

Конспект лекций по курсу «Эволюционные алгоритмы»

Еремеев А.В.

Abstract. This manuscript contains an outline of lectures on "Evolutionary Algorithms" course read by the author in Omsk State University n.a. F.M.Dostoevsky. The course covers Canonic Genetic Algorithm and various other genetic algorithms as well as evolutionanry algorithms in general. Some facts, such as the Rotation Property of crossover, the Schemata Theorem, GA performance as a local search and "almost surely" convergence of evolutionary algorithms are given with complete proofs. The text is in Russian.

Введение

Эволюционные алгоритмы (ЭА), к которым можно отнести эволюционные стратегии, генетические алгоритмы, эволюционное программирование, берут свое начало в работах А.Г. Ивахненко [10], Л.А. Растригина [14], Дж.Холланда [37], И.Реченберга [41], Л. Фогеля, А. Оуэнса, М. Уолша [17], и других авторов, вышедших в 60-70-х годах двадцатого века. Основная идея ЭА состоит в компьютерном моделировании процесса эволюции. При этом моделирование предназначено не для исследования биологических популяций, а для решения практических задач прикладной математики, в частности, задач оптимизации.

Области применения ЭА: Экономика, управление, инженерные задачи, переработка информации, космос, медицина и т.д.

Научные дисциплины, на стыке которых возникла область эволюционных вычислений:

1. Биология (генетика),
2. Прикладная математика (искусственный интеллект, методы оптимизации, теория вероятности).

Постановка задачи безусловной оптимизации в общем виде:

$$\max\{f(x) : x \in X\}, \quad (0.1)$$

где X - пространство решений (мощности континуума, счетное или конечное).

Принцип работы ГА. Один из типичных представителей эволюционных алгоритмов в оптимизации – генетический алгоритм (ГА). При запуске ГА создается «виртуальная» популяция особей (как правило достаточно хранить только их генотипы), каждая из которых представляет элемент пространства решений оптимизационной задачи. Здесь и далее используются некоторые термины, заимствованные из биологии [15].

Приспособленность особей к условиям окружающей среды выражается некоторой монотонной функцией от значения целевой функции задачи. Чем лучше решение – тем выше приспособленность особей с соответствующим генотипом. Популяция развивается за счет отбора более пригодных особей и применения к ним случайных операторов, имитирующих мутацию генов и рекомбинацию родительских генотипов (кроссинговер).

Отбор может осуществляться по-разному. Особенно распространенными являются операторы пропорциональной селекции (вероятность выбора пропорциональна пригодности), срезающей селекции (задается равномерным распределением на множестве из $T\%$ лучших генотипов популяции) и турнирной селекции (s особей извлекаются с помощью равномерного распределения, затем берется лучшая из них). Подробнее это будет обсуждаться в свое время.

ГА представляет собой универсальную схему для решения самых разных задач. Достаточно определить представление решений в виде генотипа, выбрать операторы селекции и кроссинговера, и алгоритм можно применять. Более того, при достаточно общих предположениях можно доказать, что с вероятностью единица алгоритм находит оптимальное решение, если время его работы не ограничено.

Основные принципы эволюционных алгоритмов. В области эволюционных алгоритмов находит себе применение бионический подход, состоящий в заимствовании принципов организации систем из живой природы. В данном случае имеет место использование принципа постепенных адаптивных преобразований в пределах популяции или вида в ходе, так называемой, микроэволюции. Как показывают исследования акад. Ю.П. Алтухова и других авторов (см., [1], § 6.4), более «масштабная» межвидовая изменчивость (макроэволюция) требует скачкообразных перестроек генотипа и не может быть выведена непосредственно из постепенной внутривидовой изменчивости.¹ В связи с недостаточной изученностью таких скачкообразных перестроек, привлечение известной теории происхождения видов для обоснования работоспособности ЭА представляется проблематичным и требуются непосредственные исследования ЭА (см. [47], § 1.3).

¹С одной стороны, микроэволюция многократно наблюдалась и работоспособность этой идеи не вызывает сомнения. С другой стороны, теория макроэволюции пока дает лишь правдоподобное объяснение устройства живых организмов и палеонтологических находок. Стого говоря, эта теория является лишь широко используемой гипотезой. Не совсем ясно, как эту гипотезу доказывать или проверять, т.к. для образования нового вида требуется слишком продолжительное время.

Среди специалистов по методам поиска распространено мнение, что хотя эволюционные алгоритмы и подобны природным генетическим «механизмам», биологические принципы не следует рассматривать, как ограничения при построении оптимизационных алгоритмов. Л.А. Растрингин: «... стремление к моделям механизмов биологической эволюции не должно быть чрезмерным, т.к. они созданы природой (и/или Творцом) для развития биологических существ. Переносить их без поправок на развитие технических объектов было бы серьезной методологической ошибкой.» [44]. Аналогичное мнение высказывает С.Р. Reeves: «Основные принципы отбора, рекомбинации и мутации могут быть полезны при моделировании (хотя и в довольно неточном и упрощенном виде) того, как система приспосабливается к окружающей среде, но в случаях, когда интерес представляет задача оптимизации, эти принципы сами по себе вряд ли будут эффективны за исключением отдельных случаев.» [46].

Оценка вероятности возникновения требуемого белка в результате мутации [26]:

- Число частиц во вселенной – порядка 10^{80} .
- Из принципа неопределенности Гейзенберга и общей теории относительности вытекает, что минимальный промежуток времени, имеющий физический смысл, должен быть не менее 10^{-44} сек. [36].
- Возраст вселенной по теории большого взрыва – не более $20 \cdot 10^9$ лет = $6 \cdot 10^{17}$ сек.

Тогда число событий в истории вселенной не превышает величины порядка $10^{80} 10^{44} 10^{18} = 10^{142}$.

В состав белка входят 20 различных «канонических» аминокислот. Длина последовательности в одной молекуле белка может быть около 200 аминокислот, причем даже одиночные замены элементов в этой последовательности существенно изменяют свойства белка. Таким образом, вероятность случайного получения требуемого белка при однократном испытании (случайном выстраивании 200 аминокислот) составляет около $20^{-200} \approx 10^{-260}$, в то время как общее число испытаний ограничено числом событий 10^{142} . Отсюда получаем ничтожную оценку сверху для вероятности хотя бы однократного получения требуемого белка за всю историю развития вселенной порядка: 10^{-118} .

Надо заметить, что в приведенных рассуждениях из [26] упрощенно считается, что заданным требованиям удовлетворяет только *одна* последовательность аминокислот. Для получения более реалистичной оценки требуется детальное исследование свойств трехмерной структуры белковых молекул. Кроме того, оценка может быть уточнена, если учесть кодировку аминокислот посредством нуклеотидных триплетов в молекуле ДНК.

Эвристики и метаэвристики.

Эвристика (от греч. еуρισко - обнаруживаю) - метод решения, основанный на неформальных, интуитивных соображениях, не гарантирующий получения наилучшего решения. Попытки систематизировать эвристики принадлежат Р.Декарту, Г.В.Лейбницу, Б. Больцано. (За основу взято определение из Словаря по кибернетике.)

Метаэвристика – эвристика с универсальной схемой, применимой для поиска приближенных решений различных оптимизационных задач и представляющая собой итерационный процесс, в котором многократно используются подчиненные эвристики, учитывающие особенности задачи.

В метаэвристике могут использоваться различные принципы исследования пространства решений и стратегии адаптации для учета полученной информации.

На каждой итерации метаэвристики могут выполняться операции с единственным текущим решением (или частичным решением), либо с набором (популяцией) решений. Подчиненные эвристики могут быть процедурами высокого или низкого уровня, простым локальным поиском, градиентным методом построения решения или классическими оптимизационными процедурами.

Генетические алгоритмы (ГА) наряду с алгоритмами имитации отжига, поиска с запретами и муравьиной колонии и др. относятся к классу метаэвристик.

1. Классический генетический алгоритм

Генетический алгоритм (ГА) представляет собой эвристический алгоритм оптимизации, в основу которого положены биологические принципы естественного отбора и изменчивости. Процесс работы алгоритма представляет собой последовательную смену поколений, состоящих из фиксированного числа особей-точек пространства решений, причем особи с бо́льшим значением целевой функции (более приспособленные) получают больше потомков в каждом следующем поколении. Кроме того, при формировании следующего поколения часть потомков полностью идентична родителям, а часть изменяется некоторым случайным образом в результате мутации и кроссинговера (скрещивания).

При использовании генетического алгоритма для поиска в дискретном пространстве X , каждой строке из l символов некоторого алфавита A должен быть сопоставлен элемент пространства X , т.е. определена функция $x : B \rightarrow X$, (называемая также *схемой представления*), где $B = A^l$. Строки $\xi \in B$ принято называть генотипами, а их образы $x(\xi) \in X$ – фенотипами.

В классическом генетическом алгоритме (КГА) используется двоичный алфавит $A = \{0, 1\}$.

Популяцией $\Pi = (\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^N)$ численности N является вектор пространства B^N , координаты которого называются генотипами особей (индивидов) данной популяции. Как правило, нумерация особей популяции не имеет значения. Численность популяции N фиксирована от начала работы алгоритма до конца. Предполагается, что N – четное.

Целевая функция $f : X \rightarrow R$ исходной задачи заменяется в ГА на функцию приспособленности генотипа¹ $\Phi(\xi) = \phi(f(x(\xi)))$, где $\xi \in B$. Здесь $\phi : R \rightarrow R_+$ – некоторая монотонно возрастающая функция. В биологической интерпретации функция приспособленности отражает степень приспособленности индивида с генотипом ξ к условиям "окружающей среды заданным функцией $\Phi(\xi)$. При этом максимумы целевой функции соответствуют наиболее приспособленным генотипам для данной "окружающей среды". Простейшим примером функции приспособленности является сама целевая функция при условии, что она неотрицательна.

Лучший из найденных генотипов к поколению t будем обозначать через $\tilde{\xi}^t$:

$$\tilde{\xi}^t = \operatorname{argmax}\{\Phi(\xi^{i,\tau}), i = 1, \dots, N, \tau = 0, \dots, t\}.$$

Приведем общую схему *генетического алгоритма с полной заменой*

¹В англоязычной литературе используется термин *fitness function*.

популяции. Этой схеме соответствует, в частности, КГА. Используемые здесь вероятностные операторы $\text{Sel} : B^n \rightarrow \{1, \dots, N\}$, $\text{Cross} : B \times B \rightarrow B \times B$ и $\text{Mut} : B \rightarrow B$ будут описаны ниже.

Генетический алгоритм с полной заменой популяции

0. Положить $t := 0$.
1. Для k от 1 до N выполнять:
 - 1.1. Построить случайным образом генотип $\xi^{k,0}$.
2. Для k от 1 до $N/2$ выполнять шаги 2.1-2.3:
 - 2.1. Селекция: выбрать генотипы $\xi := \xi^{\text{Sel}(\Pi^t),t}$, $\eta := \xi^{\text{Sel}(\Pi^t),t}$.
 - 2.2. Скрещивание: построить $(\xi', \eta') := \text{Cross}(\xi, \eta)$.
 - 2.3. Мутация: положить $\xi^{2k-1,t+1} := \text{Mut}(\xi')$, $\xi^{2k,t+1} := \text{Mut}(\eta')$.
3. Положить $t := t + 1$.
4. Если $t \leq t_{\max}$, то идти на шаг 2, иначе – на шаг 5.
5. Результатом работы КГА является лучшее из найденных решений $x(\tilde{\xi}^{t_{\max}})$.

Поясним приведенную схему. На этапе инициализации (шаги 0 и 1) формируется начальная популяция Π^0 , элементы которой генерируются в соответствии с равномерным распределением на множестве генотипов B , т.е. $P\{\xi_k^{i,0} = 0\} = P\{\xi_k^{i,0} = 1\} = 1/2$, $i = 1, \dots, N$, $k = 1, \dots, l$.

Вероятностный оператор селекции особей на пространстве популяций $\text{Sel}(\Pi)$ имеет то же значение, что и естественный отбор в природе. Действие этого оператора состоит в выборе номера родительской особи для построения очередного потомка. Генотип $\xi^{i,t}$ с номером i , $i = 1, \dots, N$ из популяции Π^t оказывается родительской особью при формировании очередного генотипа $\xi^{k,t+1}$ популяции Π^{t+1} с вероятностью

$$P_s(i, \Pi^t) = \frac{\Phi(\xi^{i,t})}{\sum_{j=1}^N \Phi(\xi^{j,t})}. \quad (1.1)$$

Если окажется, что $\sum_{j=1}^N \Phi(\xi^{j,t})$, то есть все генотипы имеют нулевую приспособленность, условимся выбирать номер особи с равномерным распределением из $1, \dots, N$.

В алгоритме не исключается выбор $\xi^{i,t}$ одновременно в качестве ξ и η на шаге 2.1. Описанный оператор Sel иногда также называют селекцией методом рулетки [16, 32]. Предположим, что колесо рулетки разбито на N секторов, причем сектор i соответствует особи i и имеет радианную меру $2\pi P_s(i, \Pi^t)$. Тогда селекцию особи $\xi^{i,t}$ можно представлять, как выбор i -го сектора на колесе рулетки.

Данный оператор селекции также называется *пропорциональным* в связи с тем, что при фиксированном составе популяции вероятность выбора особи в качестве родителя пропорциональна ее приспособленности.

Процедуры кроссинговера и мутации. Опишем двуместный оператор кроссинговера (скрещивания) $\text{Cross}(\xi, \eta)$ и одноместный оператор мутации $\text{Mut}(\xi)$, действие которых носит случайный характер.

Результат кроссинговера $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$ с вероятностью P_c формируется в виде

$$\begin{aligned}\xi' &= (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_\chi, \eta_{\chi+1}, \dots, \eta_l), \\ \eta' &= (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_\chi, \xi_{\chi+1}, \dots, \xi_l),\end{aligned}$$

где случайная координата скрещивания χ выбрана с равномерным распределением от 1 до $l - 1$. С вероятностью $1 - P_c$ оба генотипа сохраняются без изменений, т.е. $\xi' = \xi$, $\eta' = \eta$. Влияние оператора кроссинговера регулируется параметром P_c . Данный оператор принято называть *одноточечным кроссинговером*.²

Оператор мутации в каждой позиции генотипа с заданной вероятностью P_m изменяет ее содержимое. В противном случае ген остается без изменений. Таким образом, мутация элементов генотипа происходит по схеме Бернулли с вероятностью успеха P_m .

Изменение вероятностей мутации и кроссинговера позволяет регулировать работу КГА и настраивать его на конкретные задачи. Увеличение вероятности мутации до 0.5 превращает КГА в простой случайный перебор, имеющий весьма ограниченное применение (см. [14], § 6.1). Уменьшение же P_m до нуля приводит к малому разнообразию генотипов в популяции и может вызывать «зацикливание» КГА, когда на каждой итерации генерируются лишь ранее встречавшиеся генотипы. Величины P_c и N также могут существенно влиять на скорость сходимости популяции к решениям приемлемого качества (см., например, [7, 16]). Настраиваемые параметры КГА выбирают, как правило, в следующих диапазонах: $0 \leq P_c \leq 1$, $10^{-3} \leq P_m \leq 0.3$, $30 \leq N \leq 10000$.

В отличие от большинства представителей животного мира, особи генетических алгоритмов имеют не двойной хромосомный набор (диплоидный), а одинарный (гаплоидный), т.к. хранение дублирующих друг друга генотипов, полученных потомком от обеих родительских особей при решении оптимизационных задач не целесообразно. Особи ГА сходны с такими организмами, как мхи-гаметофиты или некоторые виды водорослей, которые имеют одинарный набор хромосом в течение длительного этапа жизни.

1.1. Способы кодировки решений, примеры использования КГА

Рассмотрим задачу оптимизации с ограничениями:

$$\max\{F(x) : x \in D \subseteq X\}, \quad (1.2)$$

где D – область допустимых решений.

²В англоязычной литературе используется термин *one-point crossover*.

1.1.1. Максимизация функции $f : \{a, a + 1, \dots, b\} \rightarrow \mathbf{N}$.

Здесь $X = \mathbf{Z}$, $\mathbf{D} = \{\mathbf{a}, \mathbf{a} + \mathbf{1}, \dots, \mathbf{b}\}$. Воспользуемся бинарной кодировкой решений: $l = \lceil \log_2(b - a) \rceil$,

$$x(\xi) = a + \sum_{j=0}^{l-1} \xi_{l-j} 2^j. \quad (1.3)$$

При $x(\xi) \in \{a, a + 1, \dots, b\}$ полагаем $\Phi(\xi) = f(x(\xi))$, иначе: $\Phi(\xi) = 0$.

1.1.2. Задача о разрезе максимального веса.

Дан граф $G = (V, E)$, $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, каждому ребру приписан вес $w : E \rightarrow \mathbf{R}^+$. Найдти разрез $\{U, U'\} : U \subseteq V, U' = V \setminus U$, максимального веса

$$W(\{U, U'\}) = \sum_{e=(u,v) \in E: u \in U, v \in U'} w(e).$$

Данная задача NP -трудна [6].

Здесь $D = X = \{\{U, U'\} : U \subseteq V, U' = V \setminus U\}$, $x = \{U, U'\}$, $f(x) = W(x)$. Кодировка определяется так: $U(\xi) = \{v_j \in V : \xi_j = 1, j = 1, \dots, n\}$, $l = n$, $x(\xi) = \{U(\xi), V \setminus U(\xi)\}$, $\Phi(\xi) = f(x(\xi))$.

Очевидно, операторы Mut и Cross сохраняют допустимость решений, поэтому они могут быть использованы непосредственно без каких-либо усовершенствований.

Есть одна сложность – вырожденность кодировки (иногда называют "конкуренцией конвенций"), т.к. один и тот же разрез $\{U, U'\}$ может быть представлен двумя способами (либо 1 кодирует вершину, лежащую в U , либо в U'). Такая неоднозначность может привести к снижению эффективности работы ГА и бессмысленности скрещивания особей, закодированных в разных "конвенциях".

1.1.3. Применение КГА в непрерывной оптимизации, способы кодировки решений, геометрический смысл кроссинговера

Случай $D \subset \mathbf{R}^n$. Если $D \subset X = \mathbf{R}^n$ ограничено, его можно дискретизовать, например, путем введения достаточно мелкой регулярной сетки. При этом задача сводится к поиску оптимума на дискретной решетке в некотором n -мерном параллелепипеде $\Omega \subset X$. Пусть область D погружена в n -мерный параллелепипед Ω :

$$D \subseteq \Omega = \{x \in \mathbf{R}^n : a_1 \leq x_1 \leq b_1, \dots, a_n \leq x_n \leq b_n\}, \quad d_i = b_i - a_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Одним из наиболее "естественных" способов кодировки представляется стандартная двоичная кодировка координат векторов в строке генотипа.

Пример: $(001\ 010\ 011\ 100) \xrightarrow{x(\xi)} (1,2,3,4)$.
В общем виде:

$$x(\xi)_i = a_i + \frac{d_i}{2^k - 1} \sum_{j=0}^{k-1} \xi_{ki-j} 2^j, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.4)$$

Здесь предполагается, что на кодирование каждой координаты используется k бит, и подстрока $g^i = (\xi_{k(i-1)+1}, \dots, \xi_{ki})$ кодирует i -ю координату, $l = kn$.

Утверждение 1.1.1. *(О геометрическом смысле кроссинговера (Р.Т. Файзуллин [30])*

Пусть i_2, i_3, \dots, i_n – номера генов, с которых начинается кодировка $2, 3, \dots, n$ -й координат вектора фенотипа из \mathbf{R}^n . Тогда если найдется такой r , что $\chi + 1 = i_{r+1}$, $1 \leq r < n$, то результат скрещивания $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$ может быть получен некоторым поворотом $R_{\chi, \xi, \eta}$ родительских фенотипов $x(\xi), x(\eta) \in \mathbf{R}^n$, оставляющим неподвижной точку $x^0 = \frac{x(\xi) + x(\eta)}{2}$. Т.е. $x(\xi') = R_{\chi, \xi, \eta}(x(\xi))$, $x(\eta') = R_{\chi, \xi, \eta}(x(\eta))$. При этом середина отрезка, соединяющего родительские фенотипы, $x^0 = \frac{x(\xi) + x(\eta)}{2}$ остается неподвижной, т.е. $R_{\chi, \xi, \eta}(x^0) = x^0$.

Доказательство. Будем искать оператор $R_{\chi, \xi, \eta}(x)$ в виде следующего аффинного преобразования:

$$R_{\chi, \xi, \eta}(x) = A(x - x^0) + x^0. \quad (1.5)$$

Случай 1. При $n - r$ четном предположим, что A - диагональная матрица с r единицами в начале диагонали, далее заполненная четным числом символов -1 . С помощью непосредственной проверки легко убедиться, что отображением $A(x - x^0) + x^0$ с матрицей указанного вида дает тот же результат, что и при действии оператора кроссинговера. Действительно, для всех координат $j \leq r$ имеем

$$(A(x(\xi) - x^0) + x^0)_j = \frac{x(\xi)_j - x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\xi)_j,$$

$$(A(x(\eta) - x^0) + x^0)_j = \frac{-x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\eta)_j,$$

а для всех j , таких что $r < j \leq n$, имеем

$$(A(x(\xi) - x^0) + x^0)_j = -\frac{x(\xi)_j - x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\eta)_j,$$

$$(A(x(\eta) - x^0) + x^0)_j = -\frac{-x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} + \frac{x(\xi)_j + x(\eta)_j}{2} = x(\xi)_j.$$

То есть, представление (1.5) корректно.

Рассмотрим 3-мерное подпространство, образованное координатами x_1, x_j, x_{j+1} , при любом $j = r + 1, r + 3, \dots, n - 1$. В этом подпространстве действие кроссинговера описывается диагональной подматрицей матрицы A с диагональю $(1, -1, -1)$, задающей поворот вокруг оси x_1 на угол π . Преобразование матрицы A есть композиция таких поворотов, следовательно, $A(x - x^0) + x^0$ является поворотом в R^n .

Случай 2. При $n - r$ нечетном рассмотрим матрицу A вида

$$\begin{vmatrix} E' & 0 & 0 & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & \cos(-2\alpha) & -\sin(-2\alpha) & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & \sin(-2\alpha) & \cos(-2\alpha) & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & 0 & 0 & -E'' \end{vmatrix}, \text{ где } \alpha = \arctg \frac{x(\eta)_{r+1} - x(\xi)_{r+1}}{x(\eta)_r - x(\xi)_r}, \text{ а}$$

единичные матрицы E' и E'' имеют размерности $r-1$ и $n-r-1$, соответственно. Непосредственная проверка, подобная сделанной в случае 1, показывает что отображение $A(x - x^0) + x^0$ с матрицей указанного вида дает тот же результат, что и оператор кроссинговера.

Рассмотрим 2-мерное подпространство, образованное координатами x_r, x_{r+1} : здесь матрица A задает поворот на угол 2α вокруг начала координат. Во всех 3-мерных подпространствах, образованных координатами x_1, x_j, x_{j+1} , при $j = r + 2, r + 4, \dots, n - 1$ преобразование A является поворотом вокруг оси x_1 на угол π , как и в случае 1. Следовательно, $A(x - x^0) + x^0$ является поворотом в R^n . Q.E.D.

1.1.4. Примеры применения КГА для задач с ограничениями

Учет ограничений задачи. Существует несколько подходов к обработке точек из $X \setminus D$.

а) Использование штрафной функции. Существует следующий простейший способ, который всегда применим: $f(x) = F(x)$ при $x \in D$, иначе $f(x) = -M$, где M – достаточно большая константа. Недостаток: все точки вне допустимой области одинаково плохи и ГА не имеет информации о близости недопустимой точки к D . Во многих задачах оптимизации поиск допустимого решения сам по себе представляет достаточно сложную задачу (например, задача ЛП сводится к поиску допустимой точки некоторой системы линейных неравенств) и без такой дополнительной информации ГА может не обнаружить ни одного допустимого решения.

Другие более эффективные способы использования штрафов (см., например, [11, 49]) состоят в "градации недопустимости" решений. Например, если область D задана системой неравенств $D = \{x \in X = \mathbf{R}^n :$

$f_1(x) \leq 0, \dots, f_m(x) \leq 0\}$, в качестве штрафной функции может быть использована $P(x) = r \sum_{i=1}^m \max\{f_i(x), 0\}$, где r достаточно велико. Далее полагают $f(x) = F(x) - P(x)$. Желательно, чтобы выполнялось условие $F(x(\xi)) - P(x(\xi)) < F(x^*) - P(x^*) = F(x^*)$ для любого ξ такого, что $x(\xi) \notin D$.

Можно воспользоваться и классическим способом сведения задач математического программирования к задачам безусловной оптимизации. Для этого рассматривается возрастающая последовательность (теоретически возрастающая до бесконечности) r_1, r_2, \dots . Для каждого $r_\theta, \theta = 1, 2, \dots, \Theta$ решается задача (1) где $f(x) = F(x) - P(x)$ и $P(x)$ найдена при $r = r_\theta$. Величина Θ задает число "больших" итераций алгоритма и выбирается исходя из значимости выполнения ограничений. Естественно при этом каждый новый запуск ГА осуществлять не со случайной начальной популяции, а с последней популяции предыдущего запуска (тогда каждое обновление r_θ можно понимать как изменение "окружающей среды" с точки зрения эволюции популяции).

б) Корректировка недопустимых решений – с помощью методов непрерывной оптимизации или каких-либо эвристик, стартуя с недопустимого решения $x(\xi) \notin D$, находят некоторое допустимое решение $x' \in D$.

с) Выбор подходящей кодировки, при которой $x(B) \subseteq D$ (пример – рассмотренная выше задача о разрезе максимального веса).

Пример 3. Если D – множество точек шара, то недопустимые решения могут проецироваться на границу шара и после этого кодироваться как особи новой популяции.

Пример 4. Задача целочисленного линейного программирования (ЦЛП)

Рассматривается задача ЦЛП следующего вида: найти

$$F(x) = (c, x) \rightarrow \max \quad (1.6)$$

при условиях

$$Ax \leq b, x \geq 0, \quad (1.7)$$

$$x \in \mathbf{Z}^n. \quad (1.8)$$

Здесь A – $(m \times n)$ - матрица, $c = (c_1, \dots, c_n)$, $b = (b_1, \dots, b_m)^T$, $x = (x_1, \dots, x_n)$. Далее предполагается, что множество \mathcal{M} , определяемое системой неравенств (1.7), ограничено. Будем называть вектор целочисленным, если все его компоненты целочисленны.

Общая схема ГА может быть легко адаптирована для задач целочисленного линейного и нелинейного программирования. Ограничимся рассмотрением ГА для задачи ЦЛП.

Многогранник допустимых решений погружается в n -мерный параллелепипед $\Omega = \{x \in \mathbf{R}^n | 0 \leq x_j \leq d_j, j = 1, \dots, n\}$ с минимальным объемом.

Границы параллелепипеда d_j могут быть найдены решением n соответствующих задач ЛП.

Минимальная длина битовой строки для кодировки координаты j целочисленной точки из Ω имеет вид $k_j = \lceil \log_2(d_j + 1) \rceil$. При кодировке допустимым целочисленным точкам в Ω сопоставляются элементы B , состоящие из n последовательно записанных двоичных представлений координат:

$$x(\xi)_j = \sum_{i=0}^{k_j-1} 2^i \xi_{k_1+\dots+k_j-i}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.9)$$

Таким образом, пространство генотипов B есть $\{0, 1\}^{k_1+\dots+k_n}$.

Оператор мутации вводится стандартным образом, а схема кроссинговера может быть адаптирована для данной задачи с помощью дополнительного условия: $\chi \in \{k_1, k_1 + k_2, \dots, k_1 + \dots + k_{n-1}\}$. (Строго говоря, при такой модификации алгоритм уже не является КГА.)

Функция приспособленности $\Phi(\xi)$ может быть определена по-разному. Определим вспомогательную функцию

$$f(x) = \begin{cases} F(x) & \text{при } s(x) = 0 \\ -Cs(x) & \text{при } s(x) > 0, \end{cases}$$

где $s(x)$ – сумма нарушений системы ограничений (1.7) для точки x и C – некоторая положительная константа, величина которой достаточна, чтобы выполнялось $f(x') < f(x)$ для всех $x, x' \in \Omega \cap \mathbf{Z}$, таких что $x \in \mathcal{M}, x' \notin \mathcal{M}$.

Функция приспособленности может быть выбрана следующим образом [32]:

$$\Phi(\xi) = \frac{f(x(\xi)) - f_{min}^t}{f_{avg}^t - f_{min}^t},$$

где f_{avg}^t, f_{min}^t – среднее и минимальное значения функции $f(x(\xi))$ на текущей популяции Π^t . Легко видеть, что определенная таким образом функция $\Phi(\xi)$ неотрицательна и неубывает с ростом $f(x)$. Отметим, что такой вариант функции приспособленности позволяет решать с помощью ГА задачи без ограничения на знак целевой функции.

Решение задачи линейного программирования (1.6)-(1.7) назовем непрерывным оптимумом.

Модификация КГА: индивиды первого поколения порождаются с помощью n -мерного нормального распределения с математическим ожиданием в точке непрерывного оптимума и с последующим округлением дробных координат.

Эксперимент показал, что если вероятность мутации достаточно велика, дисперсия начального распределения может быть установлена равной нулю. Кроме того, выяснилось, что как правило ГА относительно быстро

(по сравнению с точными алгоритмами, например, Гомори) обнаруживает допустимые решения, близкие к оптимальному по целевой функции, однако часто имеют место случаи преждевременной сходимости³ ГА к некоторому приближенному решению, в результате процесс поиска оптимума замедляется. Для преодоления этого затруднения разработан точный гибридный алгоритм [28], сочетающий ГА с перебором L -классов.

Пример 3. Простейшая задача размещения производства.

Рассматривается следующая задача оптимального размещения, известная также как задача стандартизации [2]. Пусть имеется возможность построить m предприятий, каждое из которых может обслуживать любого из n клиентов. При этом открытие i -го предприятия ($i = 1, \dots, m$) стоит $c_i \geq 0$ единиц, а обслуживание j -го клиента ($j = 1, \dots, n$) на предприятии i обходится в $C_{ij} \geq 0$ единиц стоимости. Задача состоит в минимизации функционала

$$F(z) = \sum_{i=1}^m c_i z_i + \sum_{j=1}^n \min_{i: z_i=1} C_{ij},$$

при условии, что

$$\sum_{i=1}^m z_i \geq 1,$$

где $z_i \in \{0, 1\}$. Решение z^* представляет собой оптимальный вектор - набор предприятий при поставленных условиях, причем по вектору z^* легко могут быть назначены и оптимальные прикрепления клиентов к открытым предприятиям. Очевидно, что единственным недопустимым решением является нулевой вектор $z = \mathbf{0}$.

Не теряя общности, можно предположить, что все $c_i > 0$, т.к. при $c_i = 0$ предприятие i можно включить в вектор z решения задачи в обязательном порядке – полученный после этого план обслуживания будет оптимален. При этом, если предприятие i не оказалось назначенным ни для одного клиента, его можно исключить из вектора решения.

Опишем схему КГА в применении к простейшей задаче размещения. В качестве генотипа удобно взять вектор предприятий z . В таком случае пространство генотипов совпадает с пространством фенотипов и отображение $x(\xi)$ – тождественное. Для определения функции приспособленности необходимо исходную задачу минимизации с ограничениями свести к задаче максимизации без ограничений: положим

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{F(\xi)} & \text{при } \xi \neq 0 \\ 0 & \text{при } \xi = 0. \end{cases}$$

³В англоязычной литературе используется термин *premature convergence*.

Очевидно, что тогда любой допустимый вектор пространства решений имеет бóльшую приспособленность $\Phi(\xi) = 1/f(x(\xi)) = 1/f(\xi)$, чем нулевой недопустимый вектор. Операторы мутации и кроссинговера полностью соответствует КГА.

Другой возможный подход: ГА с недвоичным представлением, где $l = n$. $\xi_j \in \{1, \dots, m\}$, $j = 1, \dots, n$. Кодировка: предприятие i обслуживает клиента j тогда и только тогда, когда $\xi_j = i$, и если хотя-бы один клиент обслуживается предприятием i , то полагаем $z_i = 1$. Данная модификация генетического алгоритма уже не укладывается в схему КГА.

1.2. ТЕОРЕМА О СХЕМАХ

Схемой H с K фиксированными позициями будем называть множество генотипов

$$H = \{\xi \in B \mid \xi_{j_1} = h_1, \xi_{j_2} = h_2, \dots, \xi_{j_K} = h_K\}, \quad \text{где } j_1 < j_2, j_2 < j_3, \dots, j_{K-1} < j_K.$$

Число K принято называть порядком схемы. Длиной $\delta(H)$ схемы H будем считать расстояние между крайними фиксированными позициями, т.е. $\delta(H) = j_K - j_1$. По определению полагаем $\delta(B) = 0$. Очевидно, что при заданной кодировке любая точка пространства состояний является частным случаем схемы порядка l .

Ввиду того, что одним генотипом могут обладать несколько особей популяции, далее удобно ввести обозначение $N(H, \Pi^t)$ для числа представителей схемы H в поколении t , аналогично $N(\xi, \Pi^t)$ – число представителей генотипа ξ в поколении Π^t . Введем специальное обозначение для среднего значения функции приспособленности на особях схемы H в поколении t :

$$\Phi(H, \Pi^t) = \frac{\sum_{i: \xi^{i,t} \in H} \Phi(\xi^{i,t})}{N(H, \Pi^t)}.$$

Рассмотрим оценку среднего числа представителей схем среди особей нового поколения, иногда называемую теоремой о схемах или фундаментальной теоремой генетических алгоритмов [32, 37].

Теорема 1.2.1. Пусть H – схема порядка K и величина c такова, что $\Phi(H, \Pi^t) \geq c\Phi(B, \Pi^t)$. Тогда в классическом генетическом алгоритме

$$E[N(H, \Pi^{t+1})] \geq c \cdot \left(1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}\right) \cdot (1 - P_m)^K N(H, \Pi^t). \quad (1.10)$$

Доказательство. Будем рассматривать очередную итерацию КГА с номером $t + 1$ в вероятностном пространстве, определенном описанной выше схемой КГА, его параметрами и совокупностью особей популяции t . Для начала рассмотрим вероятность того, что выбранный при селекции генотип принадлежит H . Она имеет вид

$$P\{\xi^{Sel(\Pi^t)} \in H\} = \sum_{i: \xi^{it} \in H} \frac{\Phi(\xi^{it})}{\sum_{j=1}^N \Phi(\xi^{jt})} = \frac{\Phi(H, \Pi^t) N(H, \Pi^t)}{\Phi(B, \Pi^t) N} \geq c \frac{N(H, \Pi^t)}{N}. \quad (1.11)$$

Кроме оператора селекции необходимо учитывать также действие мутации и кроссинговера, которые могут разрушать, а могут и создавать особи схемы H . Для получения искомой нижней оценки будем рассматривать только возможность разрушения элементов схемы H . Рассмотрим случайную величину $\zeta_i \in \{0, 1\}$, равную 1, если $\xi^{i,t+1} \in H$, и 0 иначе. Если мы оценим снизу математическое ожидание для всех ζ_i , то это даст возможность получить оценку снизу и на величину $E[N(H, \Pi^{t+1})]$, т.к.

$$E[N(H, \Pi^{t+1})] = \sum_{i=1}^N E[\zeta_i]. \quad (1.12)$$

С этой целью введем вспомогательную случайную величину ζ'_i для каждого $i = 1, \dots, N$. Пусть ζ'_i равна единице, если при построении $\xi^{i,t+1}$ на этапе кроссинговера все гены с номерами j_1, j_2, \dots, j_K были скопированы из одной родительской особи, принадлежащей H , и кроме того, при мутации ни один из этих генов не был изменен. В противном случае $\zeta'_i = 0$. Очевидно, $\zeta_i \geq \zeta'_i$ для всех i .

Заметим, что неравенство (1.11) дает оценку вероятности того, что родительский генотип, откуда при кроссинговере была скопирована позиция j_1 , принадлежал H . Введем обозначение для следующего события: $\vartheta = \{\chi < j_1 \text{ или } \chi \geq j_K\}$. Вероятность того, что при мутации ни один бит, отвечающий за принадлежность к схеме H , не изменит свое значение, равна $(1 - P_m)^K$, т.к. генные мутации происходят побитно и независимо. Таким образом, ввиду независимости события кроссинговера от всех других событий в ГА, имеем

$$P\{\zeta'_j = 1\} \geq c \frac{N(H, \Pi^t)}{N} (1 - P_m)^K P\{\theta\}. \quad (1.13)$$

Из определения кроссинговера вытекает, что $P\{\vartheta\} = 1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}$, следовательно,

$$E[\zeta'_i] = P\{\zeta'_i = 1\} \geq c \frac{N(H, \Pi^t)}{N} (1 - P_m)^K \left(1 - \frac{\delta(H)P_c}{l-1}\right). \quad (1.14)$$

Далее, из того что для любого $i = 1, \dots, N$ выполняется $E[\zeta_i] \geq E[\zeta'_i]$, с учетом (1.12) получаем (1.10). Q.E.D.

Таким образом, при выборе кодировки решений разработчик ГА должен стремиться к тому, чтобы перспективные свойства решений были бы представлены в генотипе в виде как можно более коротких участков хромосом. В таком случае эти свойства будут проще обнаруживаться в процессе работы ГА и решения с такими свойствами будут активно исследоваться.

Пример 1. Рассмотрим случай, когда число представителей схемы H , состоящей из близких к оптимуму генотипов, увеличивается. Пусть используется стандартная двоичная кодировка решений $x \in \{0, 1, \dots, 2^l\}$ для функции $f(x) \equiv x$ и $\Phi(\xi) = \sum_{j=1}^l \xi_j 2^{l-j}$, $l \geq 2$. Очевидно, $x^* = 2^l - 1$, $\xi^* = (1, 1, \dots, 1)$. Если фиксировать k первых единиц, $0 < k < l$, то в случае, когда начальная популяция содержит всевозможные генотипы по одному экземпляру, имеем

$$\Phi(H, \Pi^0) = \frac{\min_{\xi \in H} \Phi(\xi) + \max_{\xi \in H} \Phi(\xi)}{2} = \frac{\sum_{j=1}^k 2^{l-j} + 2^l - 1}{2} =$$

$$\frac{2^l \sum_{j=0}^k 2^{-j} - 1}{2} = \frac{2^l \cdot \frac{1 - (\frac{1}{2})^{k+1}}{1 - \frac{1}{2}} - 1}{2}.$$

С другой стороны, $\Phi(B, \Pi^0) = \frac{2^l - 1}{2}$. Поэтому получаем оценку снизу:

$$\frac{\Phi(H, \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} = \frac{2^{l+1} \left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right) - 1}{2^l - 1} \geq 2 \left(1 - \frac{1}{2^{k+1}}\right) = 2 - \frac{1}{2^k},$$

т.к. $2(1 - \frac{1}{2^{k+1}}) \geq 1$ и $(xa - 1)/(a - 1) \geq x$ при $a > 1, x \geq 1$.

Таким образом, пусть $c = 2 - 2^{-k}$ и $P_c = 1, k = l/4$. Тогда теорема о схемах дает:

$$E[N(H, \Pi^1)] \geq c \left(1 - \frac{l/4}{l-1}\right) (1 - P_m)^{l/4} N(H, \Pi^0),$$

и при больших l правая часть приближается к $2 \cdot \frac{3}{4} (1 - P_m)^{l/4}$, что при $P_m < 1 - \sqrt[4]{2/3}$ превышает 1, т.е. при достаточно малой вероятности мутации имеет место рост числа представителей схемы H в среднем. Например, при $l = 100$ получаем $P_m < 0.00003$.

Пример 2. Если же фиксировать k последних единиц (обозначим такую схему H'), то

$$\Phi(H', \Pi^0) = \frac{\min_{\xi \in H'} \Phi(\xi) + \max_{\xi \in H'} \Phi(\xi)}{2} = \frac{2^k - 1 + 2^l - 1}{2} = \frac{2^k(1 + 2^{l-k}) - 2}{2},$$

и, следовательно,

$$\frac{\Phi(H', \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} < \frac{1 + 2^{l-k}}{2^{l-k} - 2^{-k}}.$$

при $l - k \rightarrow \infty$ правая часть стремится к 1, т.е., при больших длинах l и существенно меньших k теорема о схемах не будет гарантировать рост числа представителей H' . Например, при $k = l/4$ и $l = 100$ получаем

$$\frac{\Phi(H', \Pi^0)}{\Phi(B, \Pi^0)} < \frac{1 + 2^{60}}{2^{60} - 1} < 1.000000000000000000018.$$

1.3. Анализ степени разнообразия популяции

Пусть $q \in \{1, \dots, l\}$ – некоторая позиция в генотипе. Обозначим $H_q = \{\xi : \xi_q = 0\}$ и рассмотрим величину

$$a_q^{(t)} = \frac{\Phi(H_q, \Pi^t) N(H_q, \Pi^t)}{\Phi(B, \Pi^t) N} = \frac{\sum_{i: \xi^i \in H_q} \Phi(\xi^{it})}{\sum_{k=1}^N \Phi(\xi^{kt})},$$

как характеристику "качества" нулевого значения гена в позиции q и его распространения в популяции Π^t .

Получим формулы, определяющие зависимость между вероятностью вырождения гена в позиции q от параметров генетического алгоритма. Заметим, что $a_q^{(t)}$ есть вероятность выбора особи, принадлежащей H_q из популяции Π^t при пропорциональной селекции.

Теорема 1.3.1. [?] Для любого значения $q \in \{1, \dots, l\}$ в КГА:

$$P\{N(H_q, \Pi^{t+1}) = N\} = (a_q^{(t)} + (1 - 2a_q^{(t)})P_m)^N, \quad (1.15)$$

$$P\{N(H_q, \Pi^{t+1}) = 0\} = (1 - a_q^{(t)} + (2a_q^{(t)} - 1)P_m)^N. \quad (1.16)$$

Доказательство. Рассмотрим подробно только равенство (1.15), так как доказательство (1.16) проводится аналогично. Рассчитаем вероятность того, что для каждого $i = 1, \dots, N/2$, имеет место $\xi^{2i,t+1} \in H_q$ и $\xi^{2i-1,t+1} \in H_q$, т.е. пара передаваемых в популяцию Π^{t+1} особей будет иметь нулевое значение в позиции q . Обозначим, соответственно, η^{2i} и η^{2i-1} генотипы этих особей перед применением к ним оператора мутации. Тогда

$$P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0\} = P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 0\}(1 - P_m)^2 + \quad (1.17)$$

$$+2P\{\eta_q^{2i} = 1, \eta_q^{2i-1} = 0\}(1 - P_m)P_m + P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 1\}P_m^2.$$

Рассчитаем вероятность $P\{\eta_q^{2i} = 0, \eta_q^{2i-1} = 0\}$. В результате скрещивания могут получиться две особи, у которых в позиции q находится значение 0, только в том случае, если у обеих родительских особей в позиции q находилось значение 0. Вероятность выбора таких особей, с учетом вероятностного смысла величин $a_q^{(t)}$ и независимости селекции каждой особи, равна $(a_q^{(t)})^2$.

Аналогично находим вероятность того, что у одной из полученных в результате скрещивания особей в позиции q находится значение 1, а у второй – значение 0. $P\{\eta_q^{2i} = 1, \eta_q^{2i-1} = 0\} = a_q^{(t)}(1 - a_q^{(t)})$.

Далее, $P\{\eta_q^{2i} = \eta_q^{2i-1} = 1\} = (1 - a_q^{(t)})^2$, так как в результате скрещивания могут получиться две особи, у которых в позиции q находится значение 1, только в том случае, если это значение находилось в позиции q у обеих родительских особей.

Подставив найденные выражения в формулу (1.17), получим, что для каждого $i, i = 1, \dots, N/2$:

$$\begin{aligned} P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0\} = \\ (a_q^{(t)})^2(1 - P_m)^2 + 2a_q^{(t)}(1 - a_q^{(t)})P_m(1 - P_m) + (1 - a_q^{(t)})^2P_m^2 = \\ = (a_q^{(t)}(1 - P_m) + (1 - a_q^{(t)})P_m)^2 = (a_q^{(t)} + (1 - 2a_q^{(t)})P_m)^2. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Так как $N/2$ пар особей в Π^{t+1} генерируются независимо одним и тем же способом, то $P\{N(H_q, \Pi^t) = N\}$ равна

$$P\{\xi_q^{2i,t+1} = 0, \xi_q^{2i-1,t+1} = 0 \forall i = 1, \dots, N/2\} = (a_q^{(t)} + (1 - 2a_q^{(t)})P_m)^N.$$

Q.E.D.

Данная теорема и следствие позволяют сделать вывод о том, что вероятность вырождения гена и, следовательно, степень разнообразия популяции зависят только от вероятности мутации и размера популяции генетического алгоритма и не зависят от вероятности скрещивания. Таким образом проявляется важное свойство рассматриваемых операторов кроссинговера, которые порождают новые комбинации из уже имеющихся "блоков но при этом никакие элементарные "блоки" не теряются.

Из теоремы следует, что вероятность вырождения значения 0 или 1 в гене q равна

$$p(q, P_m, N) = (a_q^{(t)} + (1 - 2a_q^{(t)})P_m)^N + (1 - a_q^{(t)} + (2a_q^{(t)} - 1)P_m)^N.$$

Таким образом, при $0 < a_q < 1$ вероятность вырождения гена в любой позиции уменьшается с увеличением размера популяции N , а также с приближением P_m к $1/2$, ибо условие $\frac{\partial p(q, P_m, N)}{\partial P_m} = 0$ эквивалентно

$$(a_q^{(t)} + (1 - 2a_q^{(t)})P_m)^{N-1} = (1 - a_q^{(t)} + (2a_q^{(t)} - 1)P_m)^{N-1},$$

что означает $P_m = 1/2$, а на концах интервала $p(q, 0, N) = p(q, 1, N) \geq p(q, 1/2, N)$.

Отсюда вывод: вероятность P_m следует сдвигать в сторону $1/2$, если эксперимент показывает слишком быструю сходимость КГА к малоэффективным решениям при $P_m < 1/2$.

2. Модификации генетических алгоритмов

2.1. Операторы селекции

Для сравнения различных операторов селекции, которые будут описаны далее, необходимо выбрать некоторую характеристику, которая имеет одинаковый смысл для всех из них. Возьмем в качестве такой характеристики число, сколько раз фиксированная особь отбирается в качестве родительской из популяции Π^t в процессе построения очередного поколения.

Стохастическая универсальная селекция Бэкера [32] (Backer's stochastic universal selection).

Рассмотрим всю последовательность генотипов, выбранных оператором селекции в процессе построения очередной популяции (далее – выходная последовательность): $\xi^{i_1,t}, \dots, \xi^{i_N,t}$. Индексы i_1, \dots, i_N – случайные величины. Оператор кроссинговера на итерации t применяется в следующем порядке: $\text{Cross}(\xi^{i_1,t}, \xi^{i_2,t}); \text{Cross}(\xi^{i_3,t}, \xi^{i_4,t}); \dots \text{Cross}(\xi^{i_{N-1},t}, \xi^{i_N,t})$.

Алгоритм стохастической универсальной селекции Бэкера

1. Сгенерировать случайную перестановку j_1, j_2, \dots, j_N .
2. Положить $i_k, k = 1, \dots, N$:

$$i_k = \min \left\{ i : \left\{ \frac{j_k}{N} + x \right\} \leq \sum_{j=1}^i \frac{\Phi(\xi^{j,t})}{\sum_{\ell=1}^N \Phi(\xi^{\ell,t})} \right\}.$$

Здесь и далее фигурные скобки $\{\cdot\}$, заключающие вещественное число, обозначают дробную часть данного числа.

Пусть $Z_B(i, \Pi^t)$ – число сколько раз особь с номером i отбирается в качестве родительской из популяции Π^t при селекции Бэкера.

Утверждение 2.1.1.

$$Z_B(i, \Pi^t) = \lfloor NP_{sel}(i, \Pi^t) \rfloor + u_{it},$$

где $P_{sel}(i, \Pi^t)$ определена как в стандартной рулеточной селекции, а случайная величина $u_{it} \in \{0, 1\}$ такова, что $P\{u_{it} = 1\} = \{NP_{sel}(i, \Pi^t)\}$.

Следующее утверждение показывает, что для повышения стабильности результатов в ГА предпочтительнее использовать селекцию Бэкера. Введем с.в. $Z_R(i, \Pi^t)$ для стандартной рулеточной селекции по аналогии со с.в. $Z_B(i, \Pi^t)$.

Утверждение 2.1.2. *Оператор селекции Бэкера осуществляет пропорциональную селекцию, и при этом $D[Z_B(i, \Pi^t)] \leq 1/4$, в то время как $D[Z_R(i, \Pi^t)]$ может расти неограниченно с ростом N .*

Доказательство. По формулам, характеризующим схему Бернулли для стандартной рулеточной селекции имеем: $D[Z_R(i, \Pi^t)] = Np(1 - p)$, где $p = P_{sel}(i, \Pi^t)$.

С другой стороны, для селекции Бэкера

$$E[Z_B(i, \Pi^t)] = \lfloor Np \rfloor + \{Np\} = Np = E[Z_R(i, \Pi^t)];$$

$$D[Z_B(i, \Pi^t)] = (1 - \{Np\})\{Np\}^2 + \{Np\}(1 - \{Np\})^2 = \{Np\}(1 - \{Np\}) \leq 1/4.$$

Q.E.D.

В процессе работы ГА, как правило, происходит сближение приспособленности особей в популяции. В результате операторы пропорциональной селекции все меньше «отличают» (в смысле вероятности селекции) наиболее приспособленных особей от отстающих. Способ решения этой проблемы, предложенный Д.Голдбергом, состоит в масштабировании приспособленности в процессе работы ГА [32] (см. приведенный выше пример применения ГА к задаче ЦЛП). Альтернативный подход состоит в использовании *ранжирования особей*.

Для фиксированной популяции Π биекция $r_\Pi : \{1, \dots, N\} \rightarrow \{1, \dots, N\}$ называется ранжированием, если для всех $i, j \in \{1, 2, \dots, N\}$ выполняется:

$$\Phi(\xi^i) > \Phi(\xi^j) \Rightarrow r_\Pi(i) > r_\Pi(j).$$

Значение $r_\Pi(i)$ называется рангом особи ξ^i в популяции Π .

Ранговая селекция (ranking selection). Предложена в работе Goldberg & Deb [34]. Пусть функция $\alpha : \{1, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{R}_+$, такая что $\sum_{r=1}^N \alpha(r) = 1$. Тогда α называется ранжирующей функцией.

При заданной ранжирующей функции оператор селекции с распределением вероятностей

$$P\{\text{выбрать особь с рангом } r\} = \alpha(r), \quad r = 1, \dots, N,$$

называется ранжирующей селекцией. Такая селекция не теряет «чувствительности» при сколь угодно малых различиях приспособленности особей.

Частный случай, где

$$\alpha(r) = \frac{\eta - 1}{N} \left(\frac{2(r - N)}{N - 1} + \frac{\eta}{\eta - 1} \right),$$

при $\eta \in (1, 2]$ называется линейным ранжированием. Легко видеть, что условия ранжирующей функции выполняются.

Особь с рангом N имеет вероятность селекции, равную η/N , а особь с рангом 1 – вероятность $(2 - \eta)/N$. Если положить $\eta = 2$, то особь с рангом 1 имеет нулевую вероятность селекции (наибольшая дифференциация селективности по рангу). Если же $\eta \rightarrow 1$, то распределение вероятностей селекции стремится к равномерному.

Ранговая селекция при $\eta = 2 - 2/(N + 1)$ состоит в применении оператора селекции КГА с подстановкой рангов особей $r_{\Pi}(i)$ вместо значений их приспособленности.

Турнирная селекция (tournament selection). Оператор турнирной селекции с размером турнира s (или оператор s -турнирной селекции) при построении очередного решения из текущей популяции извлекает s особей с равномерным распределением и выбирает лучшую из них (точнее, особь с наибольшим рангом).

Сравним среднее число повторений фиксированной особи ξ^{it} при 2-турнирной селекции (обозначаем далее через $Z_T(i, \Pi^t)$) и при пропорциональной селекции КГА с подстановкой рангов особей вместо значений их приспособленности (обозначаем через $Z_{RR}(i, \Pi^t)$). Заметим, что в турнирной селекции вероятность выбора особи i с рангом $r = r_{\Pi}(i)$ есть

$$\begin{aligned} p(r) &= C_s^1 \frac{1}{N} \left(\frac{r-1}{N} \right)^{s-1} + C_s^2 \left(\frac{1}{N} \right)^2 \left(\frac{r-1}{N} \right)^{s-2} + \dots + C_s^s \left(\frac{1}{N} \right)^s = \\ &= \left(\frac{1}{N} + \frac{r-1}{N} \right)^s - \left(\frac{r-1}{N} \right)^s = \left(\frac{r}{N} \right)^s - \left(\frac{r-1}{N} \right)^s. \end{aligned}$$

В частности, при $s = 2$ имеем:

$$E[Z_T(i, \Pi^t)] = Np(r) = \frac{r^2 - r^2 + 2r - 1}{N} = \frac{2r - 1}{N}.$$

Сравним эту величину с $E[Z_{RR}(i, \Pi^t)]$. Легко видеть, что при использовании ранжирования в пропорциональной селекции

$$P_{sel}(i, \Pi^t) = \frac{2r}{N(N+1)}, \quad E[Z_{RR}(i, \Pi^t)] = \frac{2r}{N+1},$$

что приближается к $E[Z_T(i, \Pi^t)]$ при больших r, N .

По формуле дисперсии для схемы Бернулли нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} D[Z_{RR}(i, \Pi^t)] &= \frac{2r(N^2 - 2r + N)}{N^3 + 2N^2 + N}, \\ D[Z_T(i, \Pi^t)] &= \frac{(2r-1)(N^2 - 2r + 1)}{N^3}, \end{aligned}$$

и при $N \rightarrow \infty$ имеем $\frac{D[Z_{RR}(i, \Pi^t)]}{D[Z_T(i, \Pi^t)]} \rightarrow \frac{2r}{2r-1}$, следовательно, при больших значениях N и r 2-турнирная селекция становится близка к стандартной пропорциональной селекции и по дисперсии.¹

2.1.1. Стратегии управления популяцией

Обновление всей популяции на каждой итерации КГА соответствует подходу, применяемому при имитационном моделировании в популяционной генетике (см., например, [1]), однако, для ускорения поиска генотипов с высокой приспособленностью общая схема ГА зачастую модифицируется. Основная мотивация при этом состоит в том, что в КГА даже генотип, существенно превышающий по пригодности все прочие особи популяции, с большой вероятностью будет исключен из рассмотрения уже на следующей итерации после его появления. Однако в успешных приложениях ГА приспособленность потомков, как правило, имеет положительную корреляцию с приспособленностью родительских генотипов. В таких случаях целесообразно сохранять наиболее пригодные особи в течение ряда итераций ГА и генерировать с помощью кроссинговера и мутации оставшуюся часть популяции. Рассмотрим некоторые известные схемы управления популяцией, реализующие этот принцип.

Элитарная стратегия. На каждой итерации ГА, во-первых, строится очередная популяция Π^{t+1} по правилам КГА. Во-вторых, если по приспособленности все генотипы новой популяции уступают максимально приспособленной (*элитной*) особи ξ_e^t из предыдущей популяции, то один из наименее приспособленных генотипов в Π^{t+1} заменяется на ξ_e^t .

Таким образом, если ГА применяется для решения задачи безусловной оптимизации (0.1), то последовательность значений целевой функции элитных фенотипов $f(x(\xi_e^1)), f(x(\xi_e^2)), \dots$ будет неубывающей. Более того, как показал Г. Рудольф [48], при $x(B) = X$ и $0 < P_m < 1$, дополнение КГА элитарной стратегией обеспечивает сходимость последовательности $f(x(\xi_e^1)), f(x(\xi_e^2)), \dots$ к оптимальному значению целевой функции задачи (0.1) почти наверное.

Вместо одной элитной особи в ГА может сохраняться некоторое подмножество генотипов текущей популяции, имеющих высокую приспособленность (см., например, [28]). Такие стратегии называются *частичной заменой популяции*. Следующая стратегия может рассматриваться как предельный случай расширения множества элитных особей.

Стационарная стратегия управления популяцией. При этой стратегии на каждой итерации ГА в популяцию добавляются два генотипа, полученных применением операторов кроссинговера и мутации. Каждая новая

¹Именно особи с большим рангом r оказывают наибольший эффект при построении очередной популяции.

особь замещает некоторый «неперспективный» генотип. При этом в качестве «неперспективного» может быть взят генотип с наименьшей приспособленностью, или генотип, выбранный с равномерным распределением среди имеющих приспособленность ниже средней в текущей популяции. В некоторых вариантах ГА на выходе кроссинговера имеется только один генотип – тогда изменяется только одна особь популяции.

Особенностью стационарной стратегии управления популяцией является значительно более быстрое «сужение» области поиска, по сравнению с КГА. В связи с этим, во многих реализациях стационарной стратегии управления популяцией при совпадении новой особи с одной из имеющихся в популяции, новая особь в популяцию не добавляется.

Элитная рекомбинация (elitist recombination) [33] (не путать с популяцией с элитой): особи текущей популяции случайным образом переставляются и последовательно выбираются пары родительских особей $(\xi^{1t}, \xi^{2t}), (\xi^{3t}, \xi^{4t}), \dots$ для скрещивания. Каждая пара потомков сравнивается с соответствующими родительскими особями, и лучшие две из четырех особей помещаются в новую популяцию.

2.2. Операторы скрещивания и мутации

Наряду с оператором одноточечного кроссинговера КГА, в генетических алгоритмах используются и другие операторы рекомбинации родительских генотипов. Общей чертой для всех из них является, так называемое, свойство *передачи генов*: значение для каждого гена потомка выбирается из значений соответствующих генов одного или другого родителей.²

В некоторых вариантах кроссинговера результатом является один генотип (см., например, [7]), однако, наиболее распространены операторы с двумя выходными генотипами. Во втором случае, с целью сохранения разнообразия популяции, стремятся построить как можно более удаленные один от другого генотипы потомков.

Пусть даны родительские генотипы ξ и η , для которых порождается пара генотипов потомков ξ', η' . Если в задаче отсутствуют ограничения, или схема представления решений такова, что $x(B) \subseteq D$, тогда уместно использовать, так называемую, *маску кроссинговера*. Под этим термином понимают вспомогательную последовательность $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_l) \in B$, по которой строятся генотипы потомков:

$$\xi'_i = \begin{cases} \xi_i, & \text{если } m_i = 1 \\ \eta_i, & \text{иначе,} \end{cases} ; \quad \eta'_i = \begin{cases} \eta_i, & \text{если } m_i = 1 \\ \xi_i, & \text{иначе,} \end{cases}$$

² Данное свойство в работах N. Radcliffe названо *gene transmission* и является частным случаем *allele transmission* (см. [?]).

для $i = 1, \dots, l$. Рассмотрим два примера использования маски кроссинговера.

Равномерный кроссинговер. Данный оператор определяется выбором маски кроссинговера с равномерным распределением на множестве B . При действии этого оператора i -ый ген, $i = 1, \dots, l$, копируется в генотип потомка из i -той позиции генотипа одного или другого родителя с равными вероятностями, независимо от выбора других генов.

k -точечный кроссинговер. Данный оператор представляет собой обобщение однотоочечного кроссинговера. В строке генотипа выбирается k различных координат скрещивания $0 < \chi_1 < \chi_2 < \dots < \chi_k < l$ с равномерным распределением среди всевозможных таких наборов. Обозначим $\chi_0 = 0$, тогда маска кроссинговера определяется следующим образом:

$$m_i = \begin{cases} 1, & \text{если } \max\{j : \chi_j < i\} - \text{четное число} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

для $i = 1, \dots, l$. Данный оператор имеет то свойство, что при задании четного числа точек скрещивания k , первая и последняя координаты одного родителя всегда переходят одному потомку. Наоборот, при нечетном k эти координаты копируются в каждый из генотипов потомков от разных родителей.

Каждый из описанных операторов кроссинговера может быть реализован и в варианте с одним генотипом потомка (для этого достаточно отбросить второй генотип). Далее будет рассмотрен оператор кроссинговера, при котором естественным образом строится только один генотип потомка.

2.2.1. Недвоичная кодировка: особенности мутации и скрещивания

Примеры: балансировка ротора [46] и задача наименьшего покрытия [7, 23].

2.2.2. Кроссинговер с частичным отображением для задач на перестановках

Рассмотрим некоторые операторы, применяемые в задаче коммивояжера и других задачах, где допустимыми решениями являются перестановки. При описании этих операторов под случайным выбором понимается выбор с равномерным распределением среди всех возможных вариантов.

Оператор кроссинговера с частичным отображением был предложен в работе Д. Голдберга и Р. Лингле [31] и кратко обозначается РМХ.³ Рассмотрим действие кроссинговера РМХ на иллюстративном примере.

Пусть даны следующие родительские генотипы с координатами скрещивания $\chi_1 = 3, \chi_2 = 7$:

$$\begin{array}{l} \xi = (1 \ 2 \ 3 \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid 8 \ 9) \\ \eta = (4 \ 5 \ 2 \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid 9 \ 3). \end{array}$$

Сначала выполняется обмен средними участками генотипов, прочие гены при этом считаются неопределенными:

$$\begin{array}{l} (x \ x \ x \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid x \ x) \\ (x \ x \ x \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid x \ x). \end{array}$$

Далее, для каждого из неопределенных значений проверяется, можно ли в этой позиции оставить прежнее значение. Например, в первом из указанных генотипов нельзя оставить 1 на первой позиции, т.к. 1 уже зафиксирована в четвертом гене, однако можно оставить на месте значения 2, 3 и 9. Аналогично, во втором генотипе можно оставить на месте 2, 9 и 3:

$$\begin{array}{l} (x \ 2 \ 3 \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid x \ 9) \\ (x \ x \ 2 \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid 9 \ 3). \end{array}$$

Наконец, остальные значения заполняются такими же попарными обмeнами, какими изменялись средние участки, только теперь обмен происходит не между генотипами, а внутри каждого из них. В рассматриваемом примере 4 меняется на 1, 5 – на 8, 6 – на 7, 7 – на 6. Таким образом, результат кроссинговера имеет вид:

$$\begin{array}{l} \xi' = (4 \ 2 \ 3 \mid 1 \ 8 \ 7 \ 6 \mid 5 \ 9) \\ \eta' = (1 \ 8 \ 2 \mid 4 \ 5 \ 6 \ 7 \mid 9 \ 3). \end{array}$$

Как показали эксперименты, кроссинговер РМХ показывает хорошие результаты в ряде задач составления расписаний, в то время как для задачи коммивояжера лучшие результаты показали операторы, основанные на наследовании свойства смежности вершин.

Формализуем оператор РМХ-кроссинговера в общем случае. Пусть пара перестановок ξ' и η' вычисляется по заданным родительским перестановкам ξ и η . В процедуре РМХ-кроссинговера два индекса χ и θ , где $\chi < \theta$, выбираются с равномерным распределением и компоненты перестановок ξ и η от χ до θ копируются в перестановки потомков ξ' и η' с обменом: $\xi'_j := \eta_j$ и

³От английского *partially mapped crossover*.

$\eta'_j := \xi_j$, $j = \chi, \dots, \theta$. Далее, для каждого $j \notin \{\chi, \dots, \theta\}$ проверяется, можно ли в этой позиции оставить значение из родительского решения, а именно, если ξ_j отсутствует среди скопированных генов, то полагаем $\xi'_j := \xi_j$. Аналогично модифицируется η' .

Остальные компоненты $j \notin \{\chi, \dots, \theta\}$ заполняются с помощью отображений $M^1(\eta_j) \equiv \xi_j$ и $M^2(\xi_j) \equiv \eta_j$. В каждом гене $j \notin \{\chi, \dots, \theta\}$ строки ξ' полагаем $\xi'_j := M^1(\xi_j)$, если значение $M^1(\xi_j)$ еще отсутствует в ξ' ; иначе $\xi'_j := M^1(M^1(\xi_j))$, если значение $M^1(M^1(\xi_j))$ еще отсутствует в ξ' , и так далее. Вторая перестановка заполняется аналогично с использованием отображения M^2 .

Если под характеристиками понимать прохождение заданного города i -тым по счету, то данный оператор будет обладать свойством 1. Вопрос: будет ли он обладать свойством 2?

2.2.3. Порядковый кроссинговер для задач на перестановках [25]

$$\begin{array}{c|cccccc} 2 & 1 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 4 & 3 & 6 & 2 & 7 & 1 & 5 \\ \chi & & & & & & \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c|cccccc} 2 & 1 & 4 & 3 & 6 & 7 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 5 & 6 & 7 \\ \chi & & & & & & \end{array}$$

Данный оператор сохраняет абсолютные позиции элементов, заимствованных от одного родителя, и относительные позиции элементов, заимствованных у другого.

Если под характеристиками понимать прохождение заданного города i -тым по счету, то данный оператор не будет обладать свойством 1. Вопрос: будет ли он обладать свойством 2?

С другой стороны, если под характеристикой понимать отношение предшествования между городами (какой пройден вперед), то свойство 1 имеет место.

Описанная пара кроссинговеров для задач на перестановках хорошо работает в задачах составления расписаний, но в ЗК лучше применять операторы, стремящиеся сохранять смежность вершин в частичных решениях.

2.2.4. Мутация в задачах на перестановках

Мутация обмена⁴ состоит в обмене пары генов из случайно выбранных позиций в данной на вход перестановке. С точки зрения локального поиска для задачи коммивояжера, при действии этого оператора выполняется шаг в случайно выбранную точку из окрестности *2-city swap* [13].

⁴В англоязычной литературе принят термин *exchange mutation*.

Мутация сдвига⁵ состоит в перемещении гена из случайно выбранной позиции на случайное число позиций влево или вправо. Содержимое всех промежуточных генов при этом сдвигается на одну позицию.

Мутация «2-замена» определяется наиболее просто в случае задачи коммивояжера в терминах фенотипов, то есть обходов графа G . В обходе, заданном входным генотипом случайным образом выбираются два несмежных ребра и заменяются двумя новыми ребрами, которые в данном случае определяются однозначно. С точки зрения локального поиска, действие данного оператора представляет собой шаг в случайно выбранную точку из окрестности, определенной относительно 2-замены [39].

Упражнение 2.2.1. *Описать алгоритм, осуществляющий мутацию «2-замена» в указанной выше двоичной кодировке решений задачи коммивояжера.*

2.3. Задача оптимальной рекомбинации

Пусть решается задача условной максимизации в пространстве двоичных строк длины n . Рассмотрим вычислительную сложность задачи отыскания наилучшего по приспособленности генотипа, как результата кроссинговера для заданной пары родительских генотипов при условии выполнения свойства передачи генов.

С учетом свойства передачи генов, сформулируем *задачу оптимальной рекомбинации*: для произвольных заданных родительских генотипов p^1, p^2 , представляющих допустимые решения, требуется найти представляющий допустимое решение генотип ξ , такой что:

- 1) для каждого $j = 1, \dots, n$ выполняется $\xi_j = p_j^1$ или $\xi_j = p_j^2$;
- 2) ξ имеет максимальное значение функции приспособленности среди всех генотипов, удовлетворяющих условию 1).

Далее множество номеров координат, в которых родительские генотипы различны, будем обозначать через $D(p^1, p^2)$.

В качестве примера эффективно разрешимой задачи оптимальной рекомбинации рассмотрим следующую известную задачу из теории графов. Пусть имеется граф $G = (V, E)$ с множеством вершин $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ и множеством ребер E . Задача о наибольшем независимом множестве состоит в отыскании такого подмножества $S \subseteq V$, что ни одно ребро $e \in E$ не инцидентно сразу двум вершинам из S (т.е. S – независимое множество) и мощность этого множества максимальна.

Естественным будет представление решений с помощью вектора-индикатора из $\{0, 1\}^n$, где $\xi_j = 1$ тогда и только тогда, когда вершина v_j

⁵В англоязычной литературе принят термин *shift mutation*.

принадлежит искомому подмножеству. Пусть $\Phi(\xi) = |x(\xi)|$ для любого допустимого решения $x(\xi)$. Как замечено в работе Э.Балаша и В.Нихауса [21], при использовании данного представления решений задача оптимальной рекомбинации разрешима за полиномиальное время.

Для того чтобы в этом убедиться, рассмотрим произвольные родительские независимые множества S_1 и S_2 и соответствующие им генотипы p_1 и p_2 . Исходя из свойства передачи генов, решение-потомок S должно содержать все множество вершин $L = S_1 \cap S_2$, кроме того, в S не должно быть элементов множества $V \setminus (S_1 \cup S_2)$, а вершины с номерами из множества $D(p^1, p^2)$ необходимо выбрать оптимальным образом. Последнее требование формулируется, как задача о наибольшем независимом множестве в подграфе, порожденном множеством вершин с номерами из $D(p^1, p^2)$. Легко видеть, что данный подграф является двудольным.

Для отыскания наибольшего независимого множества в двудольном графе $H = (V', E')$ можно воспользоваться тем фактом, что наибольшее независимое множество всегда является дополнением наименьшего вершинного покрытия C' , то есть такого наименьшего по мощности множества вершин, что каждое ребро инцидентно хотя бы одной из них.

Задача о наименьшем вершинном покрытии двудольного графа $H = (V', E')$ эффективно разрешима с помощью алгоритма построения минимального разреза во вспомогательном графе, состоящем из графа H и дополнительных вершины-источника v_0 и вершины-стока v_{n+1} . Источник v_0 соединяется со всеми вершинами одной доли, а сток v_{n+1} – со всеми вершинами другой доли. Ребрам из множества E' приписываются бесконечные пропускные способности, а ребрам, инцидентным дополнительным вершинам – единичные пропускные способности. Наименьшее вершинное покрытие C' формируется из вершин, инцидентных ребрам минимального разреза.

Генотип ξ , являющийся вектором-индикатором множества $L \cup (V' \setminus C')$ представляет собой решение задачи оптимальной рекомбинации для задачи о наибольшем независимом множестве.

Приведенный результат Балаша и Нихауса может быть сформулирован как

Теорема 2.3.1. (Балаш, Нихаус [21]) *Задача оптимальной рекомбинации для задачи о независимом множестве разрешима за полиномиальное время.*

Упражнение 2.3.1. *Показать, что для задачи о наименьшем вершинном покрытии при тех же предположениях о способе представления решений (т.е. $v_j \in C \Leftrightarrow \xi_j = 1$) задача оптимальной рекомбинации эффективно разрешима.*

Рассмотренная здесь постановка задачи оптимальной рекомбинации может быть модифицирована – см., например, [3, 7]. Выбор наиболее подходящей формулировки этой подзадачи и методов ее решения делается на основе вычислительного эксперимента.

2.4. Генетический алгоритм как метод локального поиска

2.4.1. Задачи комбинаторной оптимизации

Пусть $\{0, 1\}^*$ обозначает множество всевозможных строк из нулей и единиц произвольной длины, а \mathbf{N} – множество натуральных чисел. Для $S \in \{0, 1\}^*$ символом $|S|$ обозначается длина строки S .

Далее величина $a > 0$ будет называться полиномиально ограниченной относительно величины $b > 0$, если существует полином с положительными коэффициентами относительно b , ограничивающий сверху значения a .

Пусть \mathbb{R} обозначает множество вещественных чисел.

Определение 2.4.1. *Задача комбинаторной оптимизации – это тройка $\mathcal{P} = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I)$, где $\text{Inst} \subseteq \{0, 1\}^*$ называется множеством индивидуальных задач из \mathcal{P} , и выполнены следующие условия:*

1. *Существует детерминированная машина Тьюринга, распознающая принадлежность строки исходных данных I множеству Inst за время, полиномиально ограниченное относительно $|I|$.*

2. *$\text{Sol}(I) \subseteq \{0, 1\}^{n(I)}$ – множество допустимых решений индивидуальной задачи $I \in \text{Inst}$, причем размерность пространства решений $n(I) \leq \text{poly}(|I|)$ для некоторого полинома poly .*

3. *Для $I \in \text{Inst}$ за полиномиально ограниченное время относительно $|I|$ вычислима целевая функция $f_I : \text{Sol}(I) \rightarrow \mathbb{R}^+$, которую требуется максимизировать (если \mathcal{P} – задача максимизации) или минимизировать (если \mathcal{P} – задача минимизации).*

Если различные решения имеют разную длину записи, то $n(I)$ – наибольшая длина допустимого решения задачи. Далее через f_I^* обозначается оптимальное решение индивидуальной задачи I , т.е. $f_I^* = \max\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если \mathcal{P} – задача максимизации, либо $f_I^* = \min\{f_I(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \text{Sol}(I)\}$, если \mathcal{P} – задача минимизации.

Далее ГА рассматривается в предположении $B = \{0, 1\}^{n(I)}$ и представление решений совпадает с кодировкой решений задачи Π , а задача комбинаторной оптимизации имеет критерий «на максимум».

Кроме того будем предполагать, что при $\mathbf{x} \in \text{Sol}$, функция приспособленности имеет вид $\Phi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$. Если же $\mathbf{x} \notin \text{Sol}$, то функция приспособленности $\Phi(\mathbf{x})$ принимает значение меньше, чем на любом допустимом решении, что соответствует штрафу за нарушение ограничений задачи.

2.4.2. Задача поиска локального оптимума

Пусть для всякого элемента $\eta \in \text{Sol}(I)$ определена некоторая его окрестность $\mathcal{N}_I(\eta) \subseteq \text{Sol}(I)$. Совокупность $\{\mathcal{N}_I(\eta) : \eta \in \text{Sol}(I)\}$ называется *систе-*

мой окрестностей.

Определение 2.4.2. Если для $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$ при всяком $\eta \in \mathcal{N}_I(\mathbf{x})$ выполняется неравенство $f_I(\eta) \leq f_I(\mathbf{x})$ в случае задачи максимизации или $f_I(\eta) \geq f_I(\mathbf{x})$ в случае задачи минимизации, то решение \mathbf{x} называется локальным оптимумом в системе окрестностей \mathcal{N}_I .

Если $\mathcal{D}(\cdot, \cdot)$ – метрика, заданная для всех элементов $\mathbf{x}, \eta \in \text{Sol}(I)$, то $\mathcal{N}_I(\mathbf{x}) = \{\eta : \mathcal{D}(\mathbf{x}, \eta) \leq k\}$, $\mathbf{x} \in \text{Sol}(I)$ называется системой окрестностей радиуса k , порожденной метрикой $\mathcal{D}(\cdot, \cdot)$.

Алгоритм локального поиска начинает свою работу с некоторого допустимого решения. Далее на каждой итерации алгоритма происходит переход от текущего решения к новому допустимому решению в его окрестности, имеющему лучшее значение целевой функции, чем текущее решение. Процесс продолжается, пока не будет достигнут локальный оптимум. Способ выбора нового решения в окрестности текущего решения зависит от специфики конкретного алгоритма локального поиска.

2.4.3. Попадание локальных оптимумов в популяцию генетического алгоритма

Настоящий раздел посвящен изучению достаточных условий, при которых генетический алгоритм с полной заменой популяции и турнирной селекцией впервые посещает локальный оптимум в среднем за время, близкое к трудоемкости локального поиска. Ограничим рассмотрение задачами безусловной оптимизации вида (0.1).

Мотивацией исследования служит тот факт, что ГА зачастую относят к классу методов локального поиска (см., например, [13]), поэтому представляет интерес детальное изучение случаев, когда работоспособность ГА объясняется сходством его поведения с локальным поиском.

Для простоты обозначений здесь предполагается двоичное представление решений, совпадающее с кодировкой решений задачи комбинаторной оптимизации, а «генотип» – то же, что элемент пространства решений $\{0, 1\}^{n(I)}$. В связи с этим для обозначения генотипов, как правило, будут использоваться символы \mathbf{x} или \mathbf{y} .

Исследуется ГА с полной заменой популяции и турнирной селекцией. Для удобства анализа будем считать, что условие останова ГА никогда не выполняется.

Будем предполагать, что в результате кроссинговера с вероятностью не менее некоторой константы ε , $0 < \varepsilon \leq 1$, образуются особи $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$, хотя бы одна из которых не уступает по приспособленности родительским особям $\xi, \eta \in B$, т. е.

$$\mathbf{P}\{\max\{\Phi(\xi'), \Phi(\eta')\} \geq \max\{\Phi(\xi), \Phi(\eta)\}\} \geq \varepsilon \quad (2.1)$$

при любых $\xi, \eta \in B$. Под «констаной» в настоящем разделе понимается величина, не зависящая от индивидуальной задачи.

Для одноточечного кроссинговера условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1 - P_c$, если $P_c < 1$ – константа, не зависящая от задачи. Условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1$, если один из двух потомков – решение задачи оптимальной рекомбинации родительских решений.

Пусть имеется задача комбинаторной оптимизации $\mathcal{P} = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I)$ на максимум, причем $\text{Sol}(I) = \{0, 1\}^{n(I)}$. Последнему условию удовлетворяют многие задачи комбинаторной оптимизации, например, задача максимальной выполнимости логической формулы [6], разрез наибольшего веса [6], спиновое стекло в модели Изинга [22].

Пусть выбрана некоторая система окрестностей $\{\mathcal{N}(\xi) \mid \xi \in \text{Sol}(I)\}$. Обозначим через h число всех неоптимальных значений целевой функции f , т. е. $h = |\{f(\xi) : \xi \in \text{Sol}\}| - 1$. Тогда, начиная с любого решения, локальный поиск достигает локального оптимума не более чем за h улучшающих целевую функцию итераций. Пусть L обозначает минимальную вероятность достижения решения в пределах окрестности:

$$L = \min_{\xi \in \text{Sol}, \xi' \in \mathcal{N}(\xi)} \mathbf{P}\{\text{Mut}(\xi) = \xi'\}.$$

Чем выше величина L , тем больше согласованность оператора мутации с системой окрестностей. Численность популяции N , размер турнира s и величину L будем рассматривать как функции от исходных данных задачи I .

Будем предполагать, что в результате кроссинговера с вероятностью не менее некоторой константы ε , $0 < \varepsilon \leq 1$, образуются особи $(\xi', \eta') = \text{Cross}(\xi, \eta)$, хотя бы одна из которых не уступает по приспособленности родительским особям $\xi, \eta \in B$, т. е.

$$\mathbf{P}\{\max\{\Phi(\xi'), \Phi(\eta')\} \geq \max\{\Phi(\xi), \Phi(\eta)\}\} \geq \varepsilon \quad (2.2)$$

при любых $\xi, \eta \in B$, причем константа ε не зависит от I .

Для одноточечного кроссинговера условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1 - P_c$, если $P_c < 1$ – константа, не зависящая от I . Условие (2.2) выполняется с $\varepsilon = 1$, если один из двух потомков – решение задачи оптимальной рекомбинации родительских решений.

Пусть e – константа Эйлера.

Лемма 2.4.1. [9] Если $s \geq rN$, $r > 0$, $h > 1$, $L > 0$ и

$$N \geq \frac{2(1 + \ln h)}{L\varepsilon(1 - 1/e^{2r})}, \quad (2.3)$$

то

1. GA посещает локальный оптимум к итерации h с вероятностью не менее $1/e$, и

2. локальный оптимум достигается не позднее, чем за eh итераций ГА в среднем.

Доказательство. Пусть событие E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, N/2$, состоит в выполнении следующих трех условий:

1. из популяции Π^t при построении k -той пары потомков следующего поколения выбирается решение ξ_*^t наибольшей приспособленности;
2. при построении k -той пары потомков посредством кроссинговера, один из них имеет приспособленность не менее $\Phi(\xi_*)$ (пусть для определенности это ξ');
3. оператор мутации, примененный к ξ' , осуществляет переход в наилучшее по приспособленности решение в окрестности $\mathcal{N}(\xi')$, т. е. $\Phi(\text{Mut}(\xi')) = \max_{\eta \in \mathcal{N}(\xi')} \Phi(\eta)$.

Обозначим через p вероятность наступления хотя бы одного из событий E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, N/2$, при известной популяции Π^t . Найдем оценку $\lambda \leq p$, не зависящую от выбора Π^t . Согласно схеме ГА, $\mathbf{P}\{E_1^{t+1}\} = \dots = \mathbf{P}\{E_{N/2}^{t+1}\}$. Обозначим эту вероятность через q . Ввиду независимости событий E_k^{t+1} , $k = 1, \dots, N/2$ при фиксированной Π^t , имеем $p \geq 1 - (1 - q)^{N/2} \geq 1 - e^{-qN/2}$. Оценим снизу вероятность q :

$$q \geq L\varepsilon \left(1 - \left(1 - \frac{1}{N} \right)^{2s} \right).$$

Однако, $(1 - 1/N)^{2s} \leq (1 - 1/N)^{2rN} \leq 1/e^{2r}$, поэтому

$$q \geq L\varepsilon \left(1 - \frac{1}{e^{2r}} \right) = Lc, \quad (2.4)$$

где $c = \varepsilon \left(1 - \frac{1}{e^{2r}} \right)$. В дальнейшем мы воспользуемся тем, что из (2.3) и (2.4) вытекает

$$N \geq \frac{2}{L\varepsilon (1 - 1/e^{2r})} \geq 2/q. \quad (2.5)$$

Для оценки снизу вероятности p сначала заметим, что при любом $z \in [0, 1]$

$$1 - \frac{z}{e} \geq e^{-z}. \quad (2.6)$$

Положим $z = e^{-qN/2+1}$. Тогда ввиду неравенства (2.5), $z \leq 1$, и следовательно,

$$p \geq \exp \left\{ -e^{1-qN/2} \right\} \geq \exp \left\{ -e^{1-LcN/2} \right\}. \quad (2.7)$$

От анализа потомков фиксированной популяции Π^t перейдем к случайной последовательности популяций Π^0, Π^1, \dots . Заметим, что λ^h является оценкой снизу для вероятности достичь локальный оптимум за серию из не более h итераций, улучшающих значение рекорда целевой функции. Действительно, пусть $A_t = E_1^t + \dots + E_{N/2}^t$, $t = 1, 2, \dots$. Тогда

$$\mathbf{P}\{A_1 \& \dots \& A_h\} = \mathbf{P}\{A_1\} \prod_{t=1}^{h-1} \mathbf{P}\{A_{t+1} | A_1 \& \dots \& A_t\} \geq \lambda^h. \quad (2.8)$$

Итак, положим $\lambda = \exp\{-e^{1-LcN/2}\}$. Снова воспользовавшись условием (2.3), получаем оценку снизу для вероятности достичь локальный оптимум за серию из не более h улучшающих рекорд итераций:

$$\lambda^h = \exp\left\{-he^{1-LcN/2}\right\} \geq \exp\left\{-he^{-\ln h}\right\} = 1/e.$$

Первая часть утверждения леммы доказана.

Для оценки среднего времени получения локального оптимума рассмотрим последовательность серий по h итераций в каждой. Пусть событием D_i , $i = 1, 2, \dots$, является отсутствие локального оптимума в популяции ГА в i -той серии. При выполнении условий леммы вероятность каждого события D_i , $i = 1, 2, \dots$, не превышает $\mu = 1 - 1/e$ при любой предыстории работы алгоритма. По аналогии с (2.8) заключаем: $\mathbf{P}\{D_1 \& \dots \& D_k\} \leq \mu^k$. Таким образом, если через Y обозначить случайную величину, равную номеру первой серии, на которой локальный оптимум будет получен, то, пользуясь свойствами математического ожидания (см., например, [4]), получаем

$$E[Y] = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{P}\{Y > i\} = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \mathbf{P}\{D_1 \& \dots \& D_i\} \leq 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \mu^i = e.$$

Следовательно, локальный оптимум достигается не позднее, чем за eh итераций ГА в среднем. Q.E.D.

Пусть $\lceil \cdot \rceil$ обозначает округление вверх. Тогда в условиях леммы, при

$$N = 2 \left\lceil \frac{1 + \ln h}{L\varepsilon(1 - 1/e^{2r})} \right\rceil, \quad s = \lceil rN \rceil, \quad (2.9)$$

обеспечено получение локального оптимума в ГА за $O(h)$ итераций в среднем.

Заметим, что при $\Pi \in \text{NPO}$, функция приспособленности полиномиально вычислима, а процедура турнирной селекции требует времени $O(s) = O(N)$. Следовательно, имеет место

Теорема 2.4.1. *Если полиномиально ограничены*

- задача $\Pi = (\text{Inst}, \text{Sol}, f_I) \in \text{NPO}$,
- трудоемкости операторов *Mut* и *Cross*,
- а также функция $1/L(I)$,

то в случае $\text{Sol} = \{0, 1\}^{n(I)}$, при соответствующем выборе параметров ГА, локальный оптимум впервые достигается в среднем за полиномиально ограниченное время.

Если семейство окрестностей $\mathcal{N}(\xi)$ порождено метрикой Хэмминга с константным радиусом окрестности, то существует оператор мутации $\text{Mut}(\xi)$, вычисляемый за полиномиально ограниченное время и осуществляющий равновероятный выбор особей-потомков из множества $\mathcal{N}(\xi)$ при заданном ξ . Тогда $1/L$ также ограничена сверху некоторым полиномом от $|I|$. Таким образом, теорема 2.4.1 применима ко многим известным системам окрестностей для задач комбинаторной оптимизации.

В настоящем разделе не учитывался тот факт, что в результате действия кроссинговера приспособленность потомков может оказаться выше приспособленности родителей. Улучшение известных теоретических оценок для ГА за счет учета такой возможности является открытой задачей.

3. Эволюционные алгоритмы

3.1. Общий вид операторов ЭА [29]

В дальнейшем нам потребуется символ, обозначающий множество всех генотипов популяции Π , т.е. *генофонд*. Запишем его как $\widehat{\Pi} = \cup_{i=1}^N \{\xi^i\}$.

В общем случае работа ЭА может быть описана с помощью операторов, представляющих собой следующие рандомизированные процедуры, т.е. программы для вероятностной машины Тьюринга – см., например, [12], гл. 3.

1. Функция *Terminate* возвращает «ложь», пока следует продолжать работу, и «истина», когда необходимо остановить выполнение ЭА и выдать ответ.

2. Оператором селекции $Select : B^N \rightarrow B^{N'}$ извлекается N' копий генотипов родителей из текущей популяции, которые помещаются в промежуточную популяцию $\Pi' = Select(\Pi^t)$, причем $\widehat{\Pi}' \subseteq \widehat{\Pi}^t$.

3. Действием оператора воспроизведения $Reproduce : B^{N'} \rightarrow B^{N''}$ вносятся некоторые случайные изменения в генотипы, полученные от родительских особей. Таким образом создаются N'' генотипов-потомков, составляющих популяцию Π'' . (В частности, в случае КГА $N'' = N' = N$, и действие данного оператора состоит в последовательном применении скрещивания и мутации.)

4. С помощью оператора выживания $Survive : B^N \times B^{N''} \rightarrow B^N$ определяются генотипы из популяции Π^t и их потомки из Π'' , которые будут добавляться в очередную популяцию Π^{t+1} , т.е. $\widehat{Survive}(\Pi^t, \Pi'') \subseteq \widehat{\Pi}^t \cup \widehat{\Pi}''$.

5. Начальная популяция $\Pi^0 = Init$ строится случайным образом с помощью рандомизированной процедуры *Init*.

Работа ЭА начинается со случайной начальной популяции $\Pi^0 = Init$ и продолжается итерациями случайного отображения

$$\Pi^{t+1} = Survive(\Pi^t, Reproduce(Select(\Pi^t))),$$

пока не будет выполнено условие остановки $Terminate = \text{«истина»}$. Работа заканчивается выводом в качестве ответа лучшего найденного решения $x(\tilde{\xi}^t)$, где

$$\tilde{\xi}^t = \arg \max \{f(x(\xi^{i,\tau})) : \tau = 0, \dots, t, i = 1, \dots, N\}.$$

Условие остановки *Terminate* может быть простым ограничением по общему числу итераций, либо по числу итераций без улучшения рекорда целевой функции $f(x(\xi^t))$. В некоторых задачах можно заранее определить требуемое значение целевой функции, по достижению которого алгоритм останавливается. Как правило, в дальнейшем при теоретическом исследовании алгоритмов для удобства будем полагать, что условие остановки никогда не выполняется¹. Очевидно, всякий представитель класса эволюционных алгоритмов может быть реализован на вероятностной машине Тьюринга.

Распределение вероятностей на выходе процедур *Select*, *Reproduce*, *Survive* должно полностью определяться входными данными решаемой задачи (которую будем считать фиксированной), номером итерации t и одной или двумя популяциями-аргументами, поданными на вход процедуры. Таким образом, имеют место *марковские свойства* указанных операторов.

Марковские свойства указанных операторов могут быть формализованы следующим образом.

Пусть \mathbf{M} – вероятностная машина Тьюринга, реализующая данный ЭА, и Θ обозначает последовательность состояний, которые проходит машина \mathbf{M} до применения рассматриваемого оператора *Select*, *Reproduce* или *Survive*.

Условимся обозначать детерминированные популяции или реализации случайных популяций буквой π , а популяции, являющиеся случайными величинами – как и прежде, заглавными буквами Π (например, для реализации Π^t будем использовать π^t). Аналогично поступим с другими случайными величинами и их реализациями ($\xi, \Xi; \Theta, \theta$ и т.д.). Тогда:

1) Для любых $\pi' \in B^{N'}$, $\pi \in B^N$, $t \geq 0$ и любой последовательности состояний θ выполнено равенство

$$P \{ \pi' = \text{Select}(\pi) \} = P \{ \pi' = \text{Select}(\pi) | \Theta = \theta \}. \quad (3.1)$$

2) Для любых $\pi'' \in B^{N''}$, $\pi' \in B^{N'}$, $\pi \in B^N$, $t \geq 0$ и последовательности θ , на шаге t выполнено равенство

$$P \{ \pi'' = \text{Reproduce}(\pi') \} = P \{ \pi'' = \text{Reproduce}(\pi') | \Pi^t = \pi \ \& \ \Theta = \theta \}. \quad (3.2)$$

3) Для любых $\pi \in B^N$, $\pi'' \in B^{N''}$, $\pi' \in B^{N'}$, $\pi^{t+1} \in B^N$, $t \geq 0$ и последовательности θ на шаге t , выполнено равенство

$$P \{ \pi^{t+1} = \text{Survive}(\pi, \pi'') \} = P \{ \pi^{t+1} = \text{Survive}(\pi, \pi'') | \Pi^t = \pi \ \& \ \Pi'' = \pi'' \ \& \ \Pi' = \pi' \ \& \ \Theta = \theta \}. \quad (3.3)$$

Пример: КГА и все рассмотренные ранее его модификации соответствуют приведенной общей схеме ЭА.

¹Однако практика показывает, что многократный независимый перезапуск алгоритма зачастую позволяет значительно улучшить результаты при том же общем времени вычислений

3.2. Эволюционные стратегии (μ, λ) -ES, $(\mu + \lambda)$ -ES

Один из первых вариантов эволюционной стратегии $(1+1)$ -ES был предложен Л.А. Растригиным [14], гл. 2 (где этот алгоритм был назван *локальным поиском с пересчетом при неудачном шаге*). И. Реченберг [41] сформулировал более общие вычислительные схемы эволюционных стратегий, которые и приводятся ниже.

Прежде, чем дать описание алгоритмов, необходимо определить один вспомогательный оператор. Пусть оператор s_μ из данной на вход популяции генотипов (численностью не менее μ) выбирает без повторений μ особей с наибольшей приспособленностью и возвращает популяцию из них в качестве результата.

Общая схема алгоритмов (μ, λ) -ES и $(\mu + \lambda)$ -ES

1. Построить $\Pi^{(0)} := (\xi^{1,0}, \dots, \xi^{\mu,0})$.
2. Для $t := 0$ до $t_{max} - 1$ выполнять:
 - 2.1 Для $i := 1$ до λ выполнять 2.1.1, 2.1.2:
 - 2.1.1 Выбрать u_i с равномерным распределением из $\{1, 2, \dots, \mu\}$.
 - 2.1.2 Положить $\eta^i := Mut(\xi^{u_i,t})$.
 - 2.2 Положить $\Pi^{t+1} := \begin{cases} s_\mu(\eta^1, \dots, \eta^\lambda) & \text{в алгоритме } (\mu, \lambda)\text{-ES} \\ s_\mu(\xi^{1,t}, \dots, \xi^{\mu,t}, \eta^1, \dots, \eta^\lambda) & \text{в алгоритме } (\mu + \lambda)\text{-ES.} \end{cases}$
 - 2.3 $t := t + 1$.
3. Результат – наиболее приспособленный из найденных генотипов $\tilde{\xi}^t$.

Эволюционные стратегии изначально были предложены для задач непрерывной оптимизации, где $X \subseteq \mathbf{R}^n$ имеет мощность континуума. В таких задачах часто используются операторы мутации Mut_σ с нормально распределенным случайным шагом:

$$Mut_\sigma(\xi) = x^{-1}(x(\xi) + Z),$$

где $Z = (Z_1, \dots, Z_n)$ и Z_i , $i = 1, \dots, n$ – независимые нормально распределенные случайные величины со стандартным отклонением σ (это настраиваемый параметр алгоритма) и нулевым математическим ожиданием.

3.3. Сходимость эволюционных алгоритмов

Введем обозначение для целевой функции от фенотипа лучшей особи на поколении t :

$$F_t = \max\{f(x(\Xi^{1,t})), f(x(\Xi^{2,t})), \dots, f(x(\Xi^{N,t}))\}.$$

Определение. Будем говорить, что популяция ЭА сходится к оптимуму в задаче (1) почти наверное, если $F_t \rightarrow f^*$ почти наверное при $t \rightarrow \infty$.

Для задачи (2) сходимость популяции ЭА к оптимуму п.н. определяется аналогично.

Поведение ЭА, отвечающего приведенной выше общей схеме, может быть описано цепью Маркова. Дальнейший анализ ЭА мог бы быть осуществлен с помощью классической теории конечных марковских цепей (см., например, [48]). Тем не менее, многие важные результаты гораздо компактнее могут быть получены непосредственным изучением ЭА элементарными средствами теории вероятностей.

Определение (классификация операторов ЭА).

1. Оператор селекции *Select* будем называть *невыврожденным*, если существует такое $\epsilon_1 > 0$, что при любых $\pi^t \in B^N, \xi \in \widehat{\pi^t}, t \geq 0$

$$P\{\xi \in \widehat{Select}(\pi^t)\} \geq \epsilon_1.$$

2. Пусть B^* обозначает множество оптимальных генотипов. Оператор воспроизведения *Reproduce* будем называть *связывающим*, если существует $\epsilon_2 > 0$, такое что для любых $\xi \in B, t \geq 0$ найдется последовательность генотипов $\eta^0, \eta^1, \dots, \eta^{k(\xi)}$, где $\eta^0 = \xi, \eta^{k(\xi)} \in B^*$ и при всех $i = 0, \dots, k-1$ имеем

$$P\{\eta^{i+1} \in \widehat{Reproduce}(\pi^i)\} \geq \epsilon_2 \quad \forall \pi^i : \eta^i \in \widehat{\pi^i}.$$

3. Оператор выживания *Survive* будем называть *невыврожденным*, если существует $\epsilon_3 > 0$, такое что для любого $t \geq 0$

$$P\{\xi \in \widehat{Survive}(\pi^t, \pi'')\} \geq \epsilon_3 \quad \forall \pi^t \in B^N, \pi'' \in B^{N''} : \xi \in \widehat{\pi^t}.$$

4. Оператор выживания *Survive* будем называть *консервативным*, если для любых $\pi^t, \pi'', t \geq 0$ выполняется

$$\max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{Survive}(\pi^t, \pi'')\} \geq \max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\pi^t} \cup \widehat{\pi''}\}.$$

В данных определениях, виду марковских свойств, мы пользовались обычными вероятностями для результатов случайных операторов, вместо условных вероятностей, зависящих от предыстории работы алгоритма.

Утверждение 3.3.1. (об условных вероятностях) Для любых событий A, A', A''

$$P\{A \& A' | A''\} = P\{A | A' \& A''\} P\{A' | A''\},$$

если эти условные вероятности определены.

Доказывается трехкратным применением формулы из определения условной вероятности.

Утверждение 3.3.2. (формула полной условной вероятности) Для любых событий A, A' и альтернатив A_1, \dots, A_k таких, что $A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j$ и $A' = \cup_{i=1}^k A_i$, выполнено равенство

$$P\{A|A'\} = \sum_{i=1}^k P\{A|A_i\}P\{A_i|A'\},$$

если эти условные вероятности определены.

Доказательство.

$$P\{A|A'\} = \frac{P\{A \& A'\}}{P\{A'\}} = \sum_{i=1}^k \frac{P\{A \& A' \& A_i\}}{P\{A'\}} = \sum_{i=1}^k \frac{P\{A|A' \& A_i\}P\{A' \& A_i\}}{P\{A'\}}.$$

Пользуясь определением условной вероятности и тем, что $A' \& A_i = A_i$ для всех $i = 1, \dots, k$, приходим к требуемому равенству. Q.E.D.

Следующая теорема о непрерывности вероятностной меры известна из курса теории вероятностей.

Теорема 3.3.1. Пусть $\{A_n\}$ – последовательность множеств из сигма-алгебры событий, $A_{n+1} \subseteq A_n \forall n$, тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(A_n) = P(\cap_{n=1}^{\infty} A_n).$$

При кодировке решений задачи (0.1) оптимум может не быть представлен в пространстве генотипов. В следующей теореме такая ситуация исключается предположением, что $B^* \neq \emptyset$.

Теорема 3.3.2. о сходимости ЭА (Айбен, Аартс, ван Хи, 1989) [27, 48]. Пусть $B^* \neq \emptyset$ и функция *Terminate* никогда не возвращает значение «истина». Тогда

1. В случае невырожденной селекции и выживания, при связывающем операторе воспроизведения имеем

$$P\{\exists t : \widehat{\Pi}^t \cap B^* \neq \emptyset\} = 1 \quad (3.4)$$

(т.е. в ЭА оптимальный генотип порождается с вероятностью единица за конечное число итераций).

2. В случае выполнения равенства (3.4) при консервативном операторе выживания популяция ЭА сходится к оптимуму почти наверное.

Доказательство.

1. Рассмотрим популяцию Π^0 как случайную величину. Как будет видно в дальнейшем, вместо Π^0 можно было бы взять популяцию Π^t на любой другой итерации – это только усложнило бы обозначения. Пусть π^0 – некоторая вспомогательная (не случайная) популяция и ξ^1 – первый ее генотип.

Пусть $k(\xi^1)$ – число элементов в пути $\eta^0 = \xi^1, \eta^1, \dots, \eta^{k(\xi^1)}$ от генотипа ξ^1 до B^* из определения связывающего оператора воспроизведения, и пусть $k^* = \max\{k(\xi) : \xi \in B\}$. Очевидно, k^* конечно, т.к. B конечно.

Обозначим через $U(\xi^1, i)$ событие $\{\eta^0 \in \widehat{\Pi}^0, \eta^1 \in \widehat{\Pi}^1, \dots, \eta^i \in \widehat{\Pi}^i\}$. Рассмотрим условную вероятность $p(i) = P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}$ при наличии генотипов $\eta^j \in \widehat{\Pi}^j$ на всех итерациях j от 0 до i –той включительно, получить в новой популяции Π^{i+1} следующий генотип η^{i+1} . Здесь i принимает значения от 0 до $k(\xi^1) - 1$. Покажем, что $p(i) > 0$.

С учетом Утверждения 3.3.1 об условных вероятностях имеем:

$$p(i) \geq P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} \& \eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} = p_1 p_2, \quad (3.5)$$

где

$$p_1 = P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}^{i+1} | \eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\},$$

$$p_2 = P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' \& \eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}.$$

По Утверждению 3.3.1,

$$p_2 = P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' | \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \cdot P\{\eta^i \in \widehat{\Pi}' | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}.$$

Обозначим последний сомножитель через p_3 . Заметим, что $p_3 > 0$, т.к. по Утверждению 3.3.2

$$p_3 = \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\Pi}} P\{\eta^i \in \widehat{Select}(\Pi^i) | \Pi^i = \pi\} P\{\Pi^i = \pi | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \geq$$

$$\epsilon_1 \cdot \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\Pi}} P\{\Pi^i = \pi | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} =$$

$$\epsilon_1 \cdot \sum_{\pi: \eta^i \in \widehat{\Pi}} \frac{P\{\Pi^i = \pi \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}}{P\{U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}} = \epsilon_1.$$

Здесь суммирование ведется только по тем π , которые содержат η^i ввиду того, что оператор селекции может построить популяцию с η^i только если особь η^i имела во входной популяции.

Аналогичным способом, используя Утверждение 3.3.2, определение связывающего воспроизведения, получаем $P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi}'' | \eta^i \in \widehat{\Pi}' \& U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\} \geq \epsilon_2$ Следовательно, $p_2 \geq \epsilon_2 \epsilon_1$.

Из определения невырожденного оператора выживания с использованием Утверждения 3.3.2 также вытекает, что $p_1 \geq \epsilon_3$. Таким образом, существует достаточно малая положительная величина $\delta = \epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3$, такая что $0 < \delta < p(i)$.

Далее, пусть $p^*(\pi^0)$ будет условной вероятностью при $\Pi^0 = \pi^0$ попасть в B^* на $k(\xi^1)$ итерации, следуя за цепочкой генотипов из определения связывающего воспроизведения: $\eta^0 = \xi^1, \eta^1 \in \widehat{\Pi^1}, \eta^2 \in \widehat{\Pi^2}, \dots, \eta^{k(\xi^1)} \in \widehat{\Pi^{k(\xi^1)}} \cap B^*$.

Заметим, что для любых событий A_0, A_1, \dots, A_n , по определению условной вероятности,

$$\begin{aligned} P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_n\} &= P\{A_n | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_{n-1}\} \cdot P\{A_0 \& A_1 \& \dots \& A_{n-1}\} = \dots \\ &= P\{A_0\} \prod_{i=0}^{n-1} P\{A_{i+1} | A_0 \& A_1 \& \dots \& A_i\}. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$p^*(\pi^0) = \prod_{i=0}^{k(\xi^1)-1} P\{\eta^{i+1} \in \widehat{\Pi^{i+1}} | U(\xi^1, i) \& \Pi^0 = \pi^0\}. \quad (3.6)$$

Оценивая $p^*(\pi^0)$ с помощью δ , имеем: $p^*(\pi^0) \geq \delta^{k(\xi^1)}$. Пусть $\Delta = \delta^{k^*}$. Тогда $\min_{\pi^0 \in B^N} p^*(\pi^0) \geq \Delta$, и

$$\max_{\pi^0 \in B^N} P\{F_t < f^*, t = 0, \dots, k(\xi^1) | \Pi^0 = \pi^0\} \leq \max_{\pi^0 \in B^N} (1 - p^*(\pi^0)) \leq 1 - \Delta < 1. \quad (3.7)$$

Обозначим через $A(\vartheta)$ событие, состоящее в отсутствии оптимальных генотипов до итерации ϑ включительно. С учетом марковости операторов ЭА и формулы (3.7), для любого s имеем $P\{A(s \cdot (k^* + 1))\} \leq P\{A((s - 1)(k^* + 1))\}(1 - \Delta)$, откуда по индукции заключаем, что

$$P\{A(\vartheta)\} \leq (1 - \Delta)^{\lfloor \vartheta / (k^* + 1) \rfloor}.$$

Тогда с использованием теоремы 3.3.1 о непрерывности вероятностной меры получаем:

$$\begin{aligned} P\{\widehat{\Pi^t} \cap B^* = \emptyset \ \forall t\} &= P\left\{\bigcap_{\vartheta=0}^{\infty} A(\vartheta)\right\} = \\ &= \lim_{\vartheta \rightarrow \infty} P\{A(\vartheta)\} \leq \lim_{\vartheta \rightarrow \infty} (1 - \Delta)^{\lfloor \vartheta / (k^* + 1) \rfloor} = 0. \end{aligned}$$

2. В случае, если для любых π, π''

$$\max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{Survive}(\pi, \pi'')\} \geq \max\{f(x(\xi)) : \xi \in \widehat{\pi} \cup \widehat{\pi''}\},$$

после обнаружения оптимального генотипа, в каждой популяции Π^t будет присутствовать такой генотип, и значит, порождение оптимума за конечное число итераций обеспечивает сходимость популяции ЭА к оптимуму п.н. Q.E.D.

Опр. Оператор воспроизведения $Reproduce(\Pi')$ будем называть *положительным*, если существует такое $\epsilon > 0$, что для любых $\Pi' \in B^{N'}$, $\eta \in B$ и $t \geq 0$

$$P\{\eta \in \widehat{Reproduce(\Pi')}\} \geq \epsilon.$$

Замечание 3.3.1. Пусть $B^* \neq \emptyset$ и функция $Terminate$ никогда не возвращает значение «истина». Тогда положительности воспроизведения и консервативности выживания достаточно для сходимости популяции ЭА к оптимуму почти наверное.

Доказательство аналогично п.1 теоремы 3.3.2, т.к., полагая $k(\xi^1) = 1$, ввиду положительности воспроизведения имеем $\delta > 0$ для любой $\pi^0 \in B^N$.

Примеры:

Предположение $B^* \neq \emptyset$ будем считать выполненным.

1. КГА при $0 < p_m < 1$ обладает положительным оператором воспроизведения, т.к. при мутации из любого генотипа с ненулевой вероятностью может быть получен любой генотип.

2. Если в КГА $p_m = 0$ или $p_m = 1$, то оператор воспроизведения КГА не является связывающим, и можно привести примеры начальных популяций, начиная с которых КГА не сможет никогда найти некоторые решения.

3. Если в КГА оператор мутации заменить на одноточечную мутацию в случайно выбранном гене (с равномерным распределением), то оператор воспроизведения будет связывающим и будет применим п.1 теоремы о сходимости ЭА.

4. К КГА неприменим п.2 теоремы о сходимости ЭА, т.к. оператор выживания не является консервативным и однажды найденное оптимальное решение может быть потеряно. Однако, это свойство может быть достаточно легко обеспечено, например, как это делается в ГА с элитой.

5. Популяция (1+1)-ES с оператором мутации, который выдает любой генотип с ненулевой вероятностью (например, при мутации с нормально распределенным шагом), сходится к оптимуму почти наверное (ввиду следствия из теоремы о сходимости).

Замечание. Свойства сходимости, полученные в последней теореме (хотя бы в смысле п.1, как в КГА), являются желательными для всякого ЭА. Однако даже наличие такой сходимости не дает гарантии "надежной работы" алгоритма, т.к. на практике число выполняемых итераций за реальное время может оказаться слишком мало, чтобы вероятность получения оптимума стала близка к 1.

Как видно из примера 5, даже самый примитивный алгоритм (1+1)-ЕА с оператором мутации, имеющим равномерное распределение на множестве генотипов, обладает всеми свойствами сходимости в смысле теоремы 3.3.2. Наконец, детерминированный полный перебор генотипов всегда за конечное время находит лучший генотип, а значит, является сходящимся методом (как детерминированный алгоритм).

Из последнего замечания вытекает необходимость более тонкого исследования скорости сходимости ЭА к оптимуму с учетом специфики задачи (которая никак не использовалась в теореме о сходимости). В настоящее время это - открытая проблема. Некоторые подходы к ее решению были найдены с использованием цепей Маркова.

3.4. Алгоритмы генетического программирования

Алгоритмы генетического программирования (ГП) были предложены Н.Л.Крамером [24] и развиты далее в работах Дж. Козы [38] и других авторов. Идея ГП заключается в том, что в отличие от ГА, здесь все операции производятся не над строками, а над деревьями. При этом используются операторы, аналогичные селекции, скрещиванию и мутации ГА. С помощью деревьев предлагается кодировать программы для ЭВМ и математические формулы - таким образом можно организовать эволюцию программного кода для решения программистской задачи или поиск подходящей функции в аналитическом виде.

Можно считать, что в ГП фенотипом является программа, представленная как дерево с терминальными (листья дерева) и функциональными элементами (все прочие вершины). Терминальные элементы соответствуют константам, действиям и функциям без аргументов, а функциональные - функциям, использующим аргументы.

Например рассмотрим функцию $x*3/5-1$. Терминальные элементы здесь: $\{x, 3, 5, 1\}$, функциональные: $\{+, *, /\}$.

Схема ГП аналогична схеме ГА, однако операторы скрещивания и мутации имеют отличия.

В операторе скрещивания выбираются случайные поддеревья родительских генотипов и происходит обмен.

Таким образом, в отличие от ГА длина генотипа меняется. Для предотвращения чрезмерного разрастания дерева вводится ограничение на макси-

мальное количество функциональных элементов в дереве или максимальную его глубину. Если при скрещивании двух деревьев один из потомков не удовлетворяет такому ограничению, вместо него копируется родительское дерево.

При действии оператора мутации случайно удаляется часть дерева и вместо нее генерируется новое поддерево случайным образом. В некоторых случаях мутация сводится к случайному изменению терминальных элементов (тогда для каждого типа элементов должно быть задано распределение вероятностей, определяющее случайные изменения).

ГП может рассматриваться как частный случай ГА с изменяющейся длиной кодировки и специфическими операторами кроссинговера и мутации, поэтому для них можно применять теорему о сходимости и доказывать аналогии теоремы о схемах.

Некоторые приложения ГП: программирование, аппроксимация зависимостей (например для предсказания уровня воды в водохранилище).

3.5. Алгоритм поиска с запретами (tabu search)

Алгоритм поиска с запретами предложен Ф. Гловером (F.Glover) в 1986г. (см. [13, 40]). В классическом алгоритме локального поиска всякий раз выбирается лучшая точка в окрестности, или точка, имеющая значение целевой функции не хуже, чем текущая. Если текущая точка является локальным оптимумом, то на следующей итерации, вероятен возврат в этот же локальный оптимум. В алгоритме поиска с запретами разработан механизм предотвращения таких возвратов, основанный на использовании списка Λ из последних L решений: $\Lambda = (\lambda^1, \dots, \lambda^L) = (\mathbf{y}^{t-L}, \dots, \mathbf{y}^{t-1})$. Множество запрещенных решений при текущем решении \mathbf{y}^t и списке Λ будем обозначать через $Tabu(\mathbf{y}^t, \Lambda)$.

Как показывает практика, часто удобнее хранить список запрещенных "ходов" (tabu list), т.е. список некоторых способов изменения решений, которые приводят к запрещенным решениям.

Примеры запрещенных "ходов": недавно использованное увеличение (или уменьшение) некоторой координаты; переход в решение со значением целевой функции, присутствующим в списке $f(\lambda^1), \dots, f(\lambda^L)$; то и другое одновременно и т.д.

Было бы странно, если список запретов не позволял переходить в заведомо лучшие решения, по сравнению с найденными ранее. Для того, чтобы этого не происходило, используется "условие стремления" (aspiration condition): если целевая функция в некоторой точке \mathbf{x} из текущей окрестности выше значения целевой функции лучшего из найденных прежде решений, то следует разрешить переход в решение \mathbf{x} , независимо от Λ . Множество решений, попадающих в условия "стремления" при текущем рекорде \tilde{f} будем обозначать через $Asp(\tilde{f})$.

Часто имеется некоторый способ выделения подокрестности $\mathcal{N}'(\mathbf{y}^t) \subseteq \mathcal{N}(\mathbf{y}^t)$ в окрестности $\mathcal{N}(\mathbf{y}^t)$ (детерминированно или случайно). Это позволяет снизить трудоемкость поиска и "разнообразить" его.

Общая схема алгоритма поиска с запретами

1. Выбрать \mathbf{y}^1 случайным образом.
2. Положить $\tilde{\mathbf{y}} := \mathbf{y}^1$; $\tilde{f} := f(\mathbf{y}^1)$.
3. Инициализировать список $\Lambda = (\lambda^1, \dots, \lambda^L) := (\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^1, \dots, \mathbf{y}^1)$;

Итерация t .

4. Положить $f' := -\infty$; $\mathbf{y}' := \mathbf{y}^t$.
5. Для всех $\mathbf{y} \in \mathcal{N}'(\mathbf{y}^t) \setminus (Tabu(\mathbf{y}^t, \Lambda) \setminus Asp(\tilde{f}))$:
если $f(\mathbf{y}) > f'$, то положить $f' := f(\mathbf{y})$, $\mathbf{y}' := \mathbf{y}$.
6. Положить $\mathbf{y}^{t+1} := \mathbf{y}'$.
7. Если $f' > \tilde{f}$, то положить $\tilde{f} := f(\mathbf{y}')$, $\tilde{\mathbf{y}} := \mathbf{y}'$.
8. Обновить список Λ : исключить первый элемент, сдвинуть все элементы влево на одну позицию, положить $\lambda^L := \mathbf{y}^t$.
9. Положить $t := t + 1$.
10. Если $Terminate = \text{«ложь»}$, то перейти на шаг 4.

Замечание. Алгоритм поиска с запретами – частный случай ЭА, где $N = L + 2$ и оператор выживания является консервативным.

Вероятностный поиск с запретами (PTS).

Вероятностный поиск с запретами предложен Гончаровым Е. Н. и Кочетовым Ю. А. [5]. Пусть $D = X = \{0, 1\}^n$ – множество допустимых решений. $\mathcal{N}(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \in D : \rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq d\}$, где $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ – расстояние в метрике Хэмминга. Пусть $P\{\mathbf{x}' \in \mathcal{N}'(\mathbf{x})\} = p$ – заданная константа для любых $\mathbf{x} \in D$, $\mathbf{x}' \in \mathcal{N}(\mathbf{x})$. (Очевидно, в таком случае $P\{\mathcal{N}'(\mathbf{x}) = \emptyset\} = (1 - p)^{|\mathcal{N}(\mathbf{x})|} > 0$, если $p < 1$.)

$$Tabu(\mathbf{x}, \Lambda) =$$

$$\{\mathbf{y} \in D : \exists k \in \{1, \dots, L\} : |(\mathbf{y} - \mathbf{x})_i| = |(\lambda^{k+1} - \lambda^k)_i| \forall i = 1, \dots, n\},$$

где под λ^{L+1} понимается текущее решение \mathbf{x} .

Настраиваемые параметры: p, d, L . Как правило, $d = 1$ или 2.

Теорема 3.5.1. *О сходимости вероятностного поиска с запретами [35]. Пусть $p \in (0, 1)$. Тогда в вероятностном поиске с запретами $f(\mathbf{y}^t) \rightarrow f^*$ при $t \rightarrow \infty$ почти наверное.*

Если при пустой подокрестности $\mathcal{N}'(\mathbf{y}^t)$ список запретов оставлять без изменений и $0 < L < (n - 1)n/4$, то указанная сходимость также имеет место [5].

Приложение 1. Список задач

Упражнение 3.5.1. Показать, что при известных значениях приспособленности особей текущей популяции Π^t селекция всех родительских особей для построения новой популяции Π^{t+1} может быть выполнена в КГА за время $O(N \log_2(N))$.

Упражнение 3.5.2. Предложить взаимно-однозначное представление решений задачи о максимальном разрезе в графе при $l = n - 1$.

Упражнение 3.5.3. Пусть множество \mathcal{M} , определяемое системой неравенств (1.7), ограничено. Указать алгоритм нахождения границ d_1, \dots, d_n n -мерного параллелепипеда $\Omega = \{x \in \mathbf{R}^n | 0 \leq x_j \leq d_j, j = 1, \dots, n\}$ с минимальным объемом.

Упражнение 3.5.4. Показать, что для задачи о наименьшем вершинном покрытии при $v_j \in C \Leftrightarrow \xi_j = 1$ задача оптимальной рекомбинации эффективно разрешима.

Упражнение 3.5.5. Описать алгоритм, осуществляющий мутацию «2-замена» в кодировке решений задачи коммивояжера с помощью перестановок.

Литература

1. Алтухов Ю. П. Генетические процессы в популяциях. – М.: Академкнига, 2003. – 431 с.
2. Береснев В.Л., Гимади Э.Х., Деменьтьев В.Т. Экстремальные задачи стандартизации. - Новосибирск: Наука, 1978. - 385 с.
3. Борисовский П.А., Еремеев А.В. Генетический алгоритм для задачи о вершинном покрытии графа // Межвузовский сборник научных трудов "Математика и информатика: наука и образование Вып. 7. Омск: ОмГПУ, 2008. - С.49-54.
4. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. – М.: Наука, 1988. – 451 с.
5. Гончаров Е.Н., Кочетов Ю.А. Вероятностный поиск с запретами для дискретных задач безусловной оптимизации. // Дискретный анализ и исследование операций. Серия 2, 2002, Т. 9, № 2 с. 13-30.
<http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/koch-gon.ps>
6. Гэри М., Джонсон Д. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. -М.: Мир, 1982. - 416 с.
7. Еремеев А.В. Генетический алгоритм для задачи о покрытии. Дискретный анализ и исследование операций. Сер. 2. 2000. Т. 7, N 1. С.47-60.
8. Еремеев А.В. Генетические алгоритмы и оптимизация. Учебное пособие. Омск, ОмГУ, 2008.
9. Еремеев А. В. Исследование эволюционных методов решения задач комбинаторной оптимизации. Диссертация на соискание уч. ст. д.ф.-м.н. по специальности 05.13.17 - "Теоретические основы информатики 2013, Омск, 300 с.
<http://iitam.omsk.net.ru/~eremeev/PAPERS.MAT/eremeev.pdf>
10. Ивахненко А. Г. Системы эвристической самоорганизации в технической кибернетике. – Киев: Техника, 1971. – 371 с.
11. Карманов В.Г. Математическое программирование. - М.: Наука, 1986.
12. А.Китаев, А.Шень, М.Вялый Классические и квантовые вычисления. - М.: МЦНМО, ЧеРо, 1999. - 192 с.

13. Кочетов Ю.А. Вероятностные методы локального поиска для задач дискретной оптимизации // Дискретная математика и ее приложения: Сборник лекций молодежных научных школ по дискретной математике и ее приложениям. – М.: Изд-во центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ, 2001. – С 84-117.// <http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/publ-rus.html>
14. Растрингин Л.А. Статистические методы поиска. – М.: Наука, 1968. – 376 с.
15. Реймерс Н.Ф. Популярный биологический словарь. – М.: Наука, 1990.
16. Рутковская Д., Пилиньский М., Рутковский Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы. – М.: Горячая линия – Телеком, 2006.
17. Фогель Л., Оуэнс А., Уолш М. Искусственный интеллект и эволюционное моделирование. – М.: Мир, 1969. – 230 с.
18. Aarts E. H. L., Korst J. H. M., Laarhoven van P. J. M. Simulated annealing // Local search in combinatorial optimization / ed. by E. Aarts, J.K.Lenstra. Chichester: Wiley, 1997. P. 91–120.
19. Aggarwal C.C., Orlin J.B., Tai R.P. An Optimized Crossover for Maximum Independent Set // Operations Research. - 1997. - Vol.45. - P.225-234.
20. Altenberg, L. (1995). The schema theorem and Price's theorem. In D. Whitley and M. D. Vose (Eds.), *Foundations of Genetic Algorithms 3*, pp. 23–49. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann.
21. Balas E., Niehaus W. Optimized Crossover-Based Genetic Algorithms for the Maximum Cardinality and Maximum Weight Clique Problems // Journ. of Heuristics. - 1998. - Vol. 4, N 4, - P.107-122.
22. Barahona F.: On the computational complexity of Ising spin glass models. Journ. of Physics A, Mathematical and General **15** (1982) 3241–3253
23. Beasley J.E., Chu P.C. A Genetic Algorithm for the Set Covering Problem // European J. Oper. Res. - 1996. - Vol. 94, N 2. - P.394-404.
24. Cramer N.L. A representation for the adaptive generation of simple sequential programs // Proc. of Intern. Conf. on Genetic Algorithms and Their Applications (July 24-26, 1985, Pittsburgh, PA). 1985. pp 183-187.
25. Davis L. Job Shop Sheduling with Genetic Algorithms. In: Proceedings of International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications, J.J. Grefenstette (ed.), Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, NJ, 1985. pp. 136-140.

26. Dembski W.A. The chance of the gaps. In: Neil Manson, ed., *God and Design: The Teleological Argument and Modern Science* (London: Routledge, 2002), 251-274.
27. A.E. Eiben, E.H.L. Aarts, and K.M. van Hee. Global convergence of genetic algorithms: A Markov chain analysis. In H.-P. Schwefel and R. Männer, editors, *Parallel problem Solving from Nature*, pp. 4-12. Springer, Berlin and Heidelberg, 1991.
28. Ereemeev A. V., Kolokolov A. A. On some genetic and L-class enumeration algorithms in integer programming // *Proc. of the First International Conference on Evolutionary Computation and its Applications*. – Moscow: Russian Academy of Sciences, 1996. – P. 297–303.
29. Ereemeev A.V., Reeves C.R. Evolutionary algorithms in discrete optimisation. *Book of abstracts of Discrete Optimization and Operations Research Conference (DAOR-2002)*. Novosibirsk. pp.40-45.
30. Faizullin R.T. An approximations for genetic algorithms and star's pattern. In *Proc. of The First Online Workshop on Soft Computing*, Nagoya, 1996. – P. 77-79.
31. Goldberg D.E., Lingle R. Alleles, Loci and the Traveling Salesman Problem. In: *Proceedings of International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications*, J.J. Grefenstette (ed.), Lawrence Erlbaum Associates, Hillsdale, NJ, 1985. pp. 154-159.
32. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. - Reading: Addison Wesley, 1989. - 412 p.
33. Goldberg D., Thierens D. Elitist recombination: an itegrated selection recombination GA // *Proc. first IEEE World Congress on Computational Intelligence*. – Piscataway, New Jersey: IEEE Service Center, 1994. Vol. 1. P. 508 – 512.
34. Goldberg D. E. and Deb K. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms. In *Foundations of Genetic Algorithms*, pages 69–93. Morgan Kaufmann, 1991.
35. E.Goncharov and Yu.Kochetov, Behavior of a Probabilistic Tabu Search Algorithm for the Multi Stage Uncapacitated Facility Location Problem // *Proceedings INFORMS-KORMS*, Seoul 2000. <http://math.nsc.ru/LBRT/k5/Kochetov/seoul.doc>
36. Halliday D. and Resnick R. *Fundamentals of Physics*, 3rd ed. extended. New York: Wiley, 1988, 544.

37. Holland J.H. 1975. Adaptation in Natural and Artificial systems, University of Michigan Press, Ann Arbor, MI.
38. Koza J.R. Genetic programming. MIT Press, 1992.
39. *Пападимитриу Х., Стайглиц К.* Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложность. – М.: Мир, 1985.
40. Pirlot M. General local search methods. EJOR, v. 92, 1996, pp. 493-511.
41. Rechenberg I. 1973. Evolutionsstrategie:Optimerung Technischer Systeme nach Prinzipien der Biologischen Evolution, Formann-Holzboog Verlag, Stuttgart.
42. Radcliffe, N. J., The Algebra of Genetic Algorithms, Annals of Maths and Artificial Intelligence, 10, 1994.
43. Radcliffe, N.J., Surry, P.D., Fitness Variance of Formae and Performance Prediction, in “Foundations of Genetic Algorithms III”, (Ed: L.D. Whitley and M.D. Vose, Morgan Kaufmann), 1994.
44. Rastrigin L.A. 1996. Random Search in Evolutionary Computations. In Proceedings of the First International Conference on Evolutionary Computation and Its Applications, Moscow, 135-142.
45. Reeves C.R. Genetic Algorithms for the Operations Researcher// INFORMS Journal on Computing. - 1997. - Vol. 9, N 3. - P.231-250.
46. Reeves C.R. Genetic Algorithms: No panacea, but a Valuable Tool for the Operations Researcher. INFORMS Journal on Computing. Vol. 9, N.3, 263-265.
47. Reeves C. R., Rowe J. E. Genetic algorithms: principles and perspectives. – Norwell, MA: Kluwer Acad. Pbs., 2002. – 333 p.
48. Rudolph, G.. "Finite Markov Chain Results in Evolutionary Computation: A Tour d'Horizon"// Fundamenta Informaticae. Vol. 35. N 1-4. 1998. -pp. 67-89.
49. Smith A. E. and Tate D. M. Genetic optimization using a penalty function. In Forrest S. (ed.) Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms. Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA, 1993., pages 499-505.